



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS (FÍSICA)

ESPARCIMIENTO DE LUZ EN CRISTALES PLASMÓNICOS BIDIMENSIONALES:
MODELO DE DIPOLOS ACOPLADOS Y SIMULACIONES CON MÉTODO DE
ELEMENTO FINITO.

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
Maestra en Ciencias (Física)

PRESENTA:

Elizabeth Mendoza Sandoval

TUTOR PRINCIPAL:

Dr. Giuseppe Pirruccio
Instituto de Física, UNAM

COMITÉ TUTOR:

Dra. Ana Cecilia Noguez Garrido
Instituto de Física, UNAM

Dr. Mathieu Hautefeuille
Facultad de Ciencias, UNAM

Ciudad de México, Agosto 2022



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.

1. Datos del alumno

Mendoza
Sandoval
Elizabeth
55 26 90 25 57
Universidad Nacional Autónoma de
México
Instituto de
Física
312009191

2. Datos del tutor

Dr.
Giuseppe
Pirruccio

3. Datos del sinodal 1

Dr.
Rubén Gerardo
Barrera
y Pérez

4. Datos del sinodal 2

Dr.
Wolf Luis
Mochán
Backal

5. Datos del sinodal 3

Dr.
César Leonardo
Ordóñez
Romero

6. Datos del sinodal 4

Dr.
Alejandro
Reyes
Coronado

7. Datos del trabajo escrito

Esparcimiento de luz en cristales plasmónicos bidimensionales:
Modelo de Dipolos Acoplados y Simulaciones con Método de Elemento Finito
141 p.
Agosto, 2022

Agradecimientos

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencias y Tecnología (CONACYT) por la beca brindada bajo el número de CVU 854599.

Al programa del Posgrado en Ciencias Físicas (Física) de la UNAM.

Esta investigación fue realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT), por medio del proyecto UNAM-PAPIIT IN104522. Además de los proyectos de Ciencia de Fronteras CONACYT 1564464 y 1098652.

Asimismo, agradezco al Instituto de Física por proporcionarme la Beca de Apoyo para Estudiantes Asociados al Instituto de Física dentro de la Convocatoria Extraordinaria PRIDIF21, para finalizar mi proyecto de Tesis.

Agradezco al Dr. Giuseppe Pirruccio por su paciencia y disponibilidad para discutir los detalles de este proyecto de tesis. A la Dra. Ana Cecilia Noguez por proporcionarme un lugar de trabajo dentro del Instituto de Física y el acceso a la licencia del software comercial de COMSOL con el cual se desarrollaron las simulaciones numéricas reportadas en este trabajo. A todos los sinodales de mi proyecto tutor. Con principal agradecimiento a los doctores Rubén Barrera y Luis Mochan por indicarme algunos detalles específicos de la teoría necesarios para asentar el conocimiento adquirido al desarrollar este proyecto de Tesis.

Personalmente agradezco:

A mi madre Edith María Eugenia Sandoval Moreno, quien siempre me ha mostrado un amor tan puro que me convierte en el ser más afortunado al poder llamarme su hija.

A mi padre Saúl Guadalupe Mendoza Gutiérrez, por su apoyo de manera incondicional, por regalarme el privilegio de vivir.

A mis hermanos, Roberto Mario y Rene Gabriel, por ser mi todo, por ser mi felicidad.

A mi abuelita Margarita, por mostrarme lo que significa fortaleza, por mostrarme lo que significa ser la bondadoso.

A todos y cada uno de los miembros de mi familia, porque todas sus cariñosas distracciones me permitían darme cuenta de lo afortunada que soy en la vida; por hacerme sentir su compañía y darme fuerza cuando más la necesito; porque todos son la razón de que esté en donde me encuentro.

A Benito, porque yo le extrañaría aunque no le conociera.

Resumen

Esta tesis está dedicada a comprender la interacción luz-materia en nanoestructuras periódicas. En particular, este trabajo se centra en el estudio de las propiedades ópticas y el análisis del campo cercano de arreglos periódicos de partículas plasmónicas. El primer capítulo revisa los principios físicos y los antecedentes teóricos de las funciones de Green diádicas para problemas que involucran condiciones de frontera. En las primeras secciones, se expresan las ecuaciones de Maxwell en forma diádica para introducir la función de Green diádica asociada. El método expuesto se utiliza para estudiar la solución de campos eléctricos y magnéticos en respuesta a dipolos eléctricos infinitesimales. De esta forma, se resuelven los campos electromagnéticos producidos por una distribución de corriente cualquiera por medio de cuadratura. Cabe remarcar que para implementar el formalismo expuesto en la simulación de sistemas reales es necesario imponer condiciones de contorno acordes al problema a resolver, por lo que en las últimas secciones del primer capítulo se introduce la clasificación de la función de Green diádica en términos de las condiciones de frontera.

Posteriormente, el trabajo se divide en dos partes, principalmente. En la primera de ellas se introduce el método de elementos finitos y el modelo de dipolos acoplados, métodos que se abrevian por las siglas FEM y CDM, respectivamente, acorde a su dominación en inglés. Para FEM, el formalismo se analiza en términos de una implementación numérica. Para el segundo (CDM), se desarrolla el formalismo de la aproximación dipolar para obtener un modelo semianalítico con el cual poder calcular la respuesta óptica de sistemas periódicos compuestos por dispersores dipolares. Ambos métodos se encuentran en función de: las propiedades ópticas de los componentes del sistema (partículas y entorno que las rodea), propiedades geométricas y de simetría del sistema, así como de las características del campo incidente como polarización, amplitud, frecuencia, entre otras. Consecuentemente, analizando el acoplamiento del sistema con el campo externo en función de las características del sistema, se comprueba la implementación de los métodos FEM y CDM para maximizar la sección transversal de dispersión en función de la optimización de las características del sistema periódico. De esta manera, en el presente trabajo se demuestra el aprovechamiento de los métodos expuestos para mejorar o suprimir modos específicos que, a su vez, sintonizan el campo eléctrico cercano.

Por otra parte, dado que el CDM se resuelve de forma autoconsistente y su implementación requiere modelado computacional, en el segundo capítulo de la tesis se introduce el concepto de suma reticular, el cual cuantifica la interacción de todos los dipolos en el sistema periódico. Particularmente, la suma reticular requiere un análisis especial ya que corresponde a una suma condicionalmente convergente, por lo que en este trabajo se discute extensamente dicha cuestión. En resumen, la convergencia de este término se logra mediante dos métodos. El primero corresponde a agregar un parámetro de amortiguamiento para limitar la contribución de los dipolos

vecinos en la red de suma. El segundo es el Método de Ewald, que consiste en descomponer una suma poco convergente en dos términos exponencialmente convergentes. Ambos métodos se describen en detalle en este trabajo.

Finalmente, en el último capítulo se implementan los métodos FEM y CDM. Primero, el FEM se usa para justificar la respuesta dipolar en nanopartículas del tamaño de varias decenas de nanómetros. Para ello, en este trabajo se analizó la sección eficaz de dispersión y absorción de una partícula esférica y cilíndrica de 50 nm de radio y con alturas de 100 nm, 50 nm y 20 nm para los cilindros. Con base en los resultados numéricos, la densidad de carga en la superficie de cada partícula confirma un carácter dipolar en el rango de longitud de onda larga, cuyo límite inferior de aceptación depende fuertemente de las dimensiones de la partícula. Posteriormente, con base en el análisis de partícula aislada, se implementan los métodos de FEM y CDM para estudiar la respuesta óptica de sistemas periódicos con simetría de traslación hexagonal, compuestos por nanopartículas de plata esféricas y cilíndricas, geometrías de partículas que coinciden con las estudiadas en el caso de partícula aislada. Particularmente, en la implementación de cada modelo, se estudió en detalle las condiciones necesarias para la convergencia de los métodos. Como resultado del modelado de los sistemas, se demuestra la congruencia de resultado en el estudio de la relación de dispersión y el campo cercano por lo diferentes métodos empleados. Más aún, al comparar los resultados obtenidos mediante el método semianalítico (CDM) con los resultados obtenidos con el método numérico (FEM), los cuales contemplan contribuciones multipolares de orden mayor al dipolar, se comprueba que la respuesta del sistema estudiado corresponde principalmente a la interacción dipolar entre las dos subredes triangulares no equivalentes, que naturalmente conducen a una distribución asimétrica del campo cercano alrededor de las nanoesferas.

En resumen, en esta tesis se desarrollan e implementan herramientas de modelado para estudiar la interacción luz-materia a nanoescala la cual, a su vez, permite diseñar sistemas optoelectrónicos basados en nanoestructuras.

Abstract

This thesis is devoted to understanding light-matter interaction in periodic nanostructures. In particular, this work focuses on the optical properties and the near field of periodic arrays of plasmonic particles. The first chapter reviews the physical principles and the theoretical background of the dyadic Green functions for problems involving boundary conditions. Here, Maxwell's equations are cast in a dyadic form to introduce the electric and the magnetic dyadic Green function. The introduced method is used to study the solution of electric and magnetic fields in response to infinitesimal electric dipoles. In this way, it is conceivable that the field due to any current distribution can be found by a quadrature. Nevertheless, to apply this formalism to simulate real systems it is necessary to impose boundary conditions. The classification of dyadic green function in terms of the boundary conditions is introduced in the final part of the first chapter.

Afterward, the work is divided into two parts. In the first one, the finite element method (FEM) and the coupled dipole model (CDM) are introduced. For FEM, the formalism is discussed in terms of numerical implementation. For the second one, the formalism of the coupled dipole model is developed to achieve a semi-analytical model to calculate the optical response of periodic systems composed of dipolar scatterers. Both methods put on the same footing geometric and optic properties and the symmetry of the incident field, which is a function of the lattice periodicity. It allows the analysis of the coupling of the system with the external field so that optimal geometry for maximum scattering cross-section can be predicted. It exploits the symmetry of the incident electromagnetic field to enhance or suppress specific modes, which, in turn, tunes the electric near field.

On the other hand, thanks to the fact that the CDM is solved in a self-consistent way and its implementation requires computational modeling, in the second chapter of the thesis the concept of lattice sum is introduced, which quantifies the interaction of all dipoles in the lattice. The lattice sum requires special attention since it converges poorly. In this work, the problem is treated extensively. Particularly, the convergence of this term is achieved using two methods. The first corresponds to adding a damping parameter to limit the contribution of neighbor dipoles in the sum lattice. The second is Ewald's Method, which consists in splitting a poorly convergent sum into two exponentially converging terms. Both methods are described in detail in this work.

Finally, the implementation of FEM and CDM is carried out. First, the FEM is used to justify the dipole behavior in nanoparticles with size of several tens of nanometers. To this end, this work analyzes the scattering and absorption cross-section of a spherical and cylindrical particle with a radius of 50 nm. Based on the numerical results, the charge density on the particle surface confirms the dipolar character in the wavelength range above 500 nm. Next, the methods

of FEM and CDM are used to study the surface lattice resonances in free-standing honeycomb lattices composed of silver nanospheres. In this implementation, the necessary conditions for convergence of the numerical and semi-analytical methods are studied in detail. By combining numerical simulations with analytical methods, the dispersion relation, and the near-field properties of these modes along Γ -M symmetry trajectory are analyzed. It is found that the results can be interpreted in terms of dipole-only interactions between the two non-equivalent triangular sublattices, which naturally lead to an asymmetric near-field distribution around the nanospheres.

In conclusion, this thesis capitalizes on modeling tools for light-matter interaction at the nanoscale, which is adapted to a general class of device structures and allows us to design optical surfaces based on nanostructures.

Índice general

1. Introducción	1
2. Teoría del Electromagnetismo	3
2.1. Introducción	3
2.2. Ecuaciones del electromagnetismo	3
2.2.1. Potenciales	8
2.2.1.1. Marco teórico de la Teoría de ecuaciones diferenciales	10
2.3. Función de Green para la ecuación de Helmholtz escalar	12
2.4. Función de Green en coordenadas esféricas	20
2.4.0.1. Teoría de expansión en funciones propias.	23
2.4.0.2. Funciones de Bessel	25
2.4.1. Función de green Reducida	29
2.5. Función de Green Diádica	30
2.5.1. Campo de radiación de dipolos puntuales	31
2.5.2. Función de Green diádica dipolar en espacio libre	34
2.5.3. Clasificación de la función de Green diádica	36
3. Métodos Teóricos en la óptica a la Nanoescala	43
3.1. Método Numérico. Elemento finito (FEM)	44
3.2. Métodos Semi-analíticos	45
3.2.1. Ecuación integral de Volumen	47
3.2.2. Método de momentos	48
3.2.2.1. Potenciales de Debye	48
3.2.2.2. Expansión en funciones propias de la función de Green Diádica en el espacio libre	51
3.2.2.3. Difracción de una onda plana por una esfera	54
3.3. Aproximación dipolar.	59
3.3.1. Tensor de polarizabilidad pura.	60
3.3.2. Modelo de Drude - Función dieléctrica modificada	61
3.4. CDM: Momento dipolar inducido en estructuras periódicas	65
3.4.0.1. Descripción geométrica de un sistema periódico	65
3.4.1. Respuesta de una partícula en la red.	66
3.5. CDM: Respuesta óptica de la red	71
3.5.1. Campo lejano	73
3.5.2. Suma Reticular	76
3.5.2.1. Función de Green Cuasi-Periódica	77
3.5.2.2. Método de Ewald	81

ÍNDICE GENERAL

3.5.2.3. Análisis de convergencia de la función de Green cuasi-periódica . . .	84
3.5.3. Cálculo del campo esparcido por el arreglo	88
3.5.3.1. Resumen de expresiones analíticas	93
4. Simulación de Propiedades Ópticas de Nanoestructuras	95
4.1. Método de Elemento Finito	95
4.1.1. Software COMSOL. Módulo Wave Optics	96
4.2. Partícula Aislada	97
4.3. Estudio de cristal plasmónico con simetría hexagonal	102
4.3.1. Modelo de Dipolos Acoplados	104
4.3.2. Método de Elemento Finito	106
5. Conclusiones	113
A. Análisis temporal de la Teoría del Electromagnetismo	115
A.1. Función de Green dependiente del tiempo	115
A.1.1. Solución de los potenciales electromagnéticos	121
A.1.2. Forma integral de la ecuación de Schrödinger	123
A.2. Conservación de energía	123
B. Análisis Diádico	127
B.1. Método Algebraico	131
C. Análisis de dispersión de luz	135
C.1. Imagen de espectro angular	135
C.2. Medición experimental	136

Introducción

Dentro del vasto campo de la fotónica, las estructuras ordenadas siempre han recibido una atención especial. Actualmente, están en el centro de varios campos de investigación íntimamente relacionados con la simetría, como la fotónica topológica[1], no recíproca[2], y \mathcal{PT} -simétrica[3], y ayudaron a demostrar efectos fascinantes que incluyen propagación de modos singulares de luz[4], acoplamiento espín-órbita[5] y estados de borde óptico[6].

Durante la última década la investigación experimental sobre cristales plasmónicos, arreglos bidimensionales ordenados de nanopartículas metálicas acopladas, ha crecido considerablemente, ya que estos sistemas sostienen modos plasmónicos-fotónicos híbridos colectivos, conocidos como resonancias de redes de superficie (SLR), que surgen del acoplamiento de plasmones localizados de superficie, de las nanopartículas individuales, con las anomalías de Rayleigh sostenidas por el sistema periódico, como se ilustra en la Figura (1.1). Hasta cierto punto, estos modos representan el análogo óptico de los modos electrónicos de Bloch que se encuentran en los cristales atómicos y de esta manera, también es común estudiar la dispersión de los modos ópticos a lo largo de trayectorias de alta simetría dentro de la primera zona de Brillouin. De dicho análisis, se demuestra que los puntos de alta simetría muestran la degeneración de bandas ópticas, jugando un papel importante en la determinación de las características del campo cercano. Cabe mencionar que, hasta ahora, la gran mayoría de los estudios se han centrado en geometrías simples, típicamente basadas en redes de Bravais. Sin embargo, ha sido suficiente para que surjan fenómenos inesperados, como el plasmón [7] y el láser de polaritón [8], el acoplamiento fuerte de luz-materia [9] y las transiciones de fase cuántica [10], lo que hace que esta área de investigación sea activa y de rápido crecimiento.

Después de varios estudios dedicados a la comprensión de cómo los parámetros y la distancia entre partículas afectan la dispersión SLR, ahora la atención se está desplazando hacia el descubrimiento del papel de la simetría de la red y la complejidad de su celda unitaria [11]. En las redes plasmónicas de Bravais cuadradas y rectangulares convencionales, el alto grado de simetría da como resultado muchas bandas ópticas degeneradas. Inspirados por el desarrollo reciente en la ciencia de los materiales y el descubrimiento innovador de una nueva clase de materiales bidimensionales que no son de Bravais, las redes plasmónicas que no son de Bravais comenzaron a recibir atención, como es el caso de la red con simetría de traslación hexagonal o de panal.

Aunque las ecuaciones que rigen las redes atómicas y ópticas son diferentes, se pueden establecer analogías basadas en la invariancia de traslación y el teorema de Bloch. Asimismo, dado que la física del grafeno y los dicalcogenuros de metales de transición se remontan a su estructura cristalina de panal y la presencia de puntos K no equivalentes en el espacio recíproco; al explotar sistemas fotónicos con las mismas propiedades de simetría, se han contemplado propiedades ópticas notables. Más aún, cabe remarcar que en el caso de los cristales plasmónicos se cuenta con una

1. INTRODUCCIÓN

libertad en el diseño de celda unitaria ya que la periodicidad del sistema depende únicamente de la fabricación, mientras que en los cristales atómicos su estructura está limitada por la interacción electromagnéticas entre los átomos que lo componen.

Las capacidades de mejorar la nanofabricación proporcionadas por el haz de electrones y la litografía óptica permitieron realizar nanoestructuras casi libres de defectos, un ingrediente crucial para lograr un comportamiento colectivo fuerte. Aunque la fabricación de redes complejas que no sean de Bravais sigue siendo un desafío, la litografía de nanoesferas ofrece una forma relativamente fácil y económica de obtener redes plasmónicas hexagonales de forma natural. Esta técnica se introdujo por primera vez como medio para obtener sustratos SERS a gran escala [12], pero la presencia de defectos dificultó el estudio cuantitativo de las propiedades plasmónicas. Últimamente, los avances en el proceso de autoensamblaje mejoraron la calidad de las resonancias ópticas y se pudieron investigar varias propiedades en áreas extensas, incluida la no linealidad óptica de tercer orden [13], SERS [14], biodetección [15] y emisión espontánea modificada de átomos débilmente acoplados a la red [16]. Curiosamente, la importancia de fabricar redes plasmónicas grandes ha sido destacada recientemente por un estudio teórico sobre la relación entre el número de celdas unitarias y las propiedades colectivas de campo cercano.

En particular, se estudió la dispersión de las SLR en redes plasmónicas con simetría de traslación hexagonal, con particular atención en el estudio de la trayectoria $\Gamma - K$ del espacio dual, para la polarización s de la luz incidente. El estudio de dichas redes puede realizarse con base en la implementación de simulaciones numéricas y cálculos semi-analíticos basados en el método de dipolos acoplado, como se abordó en el presente trabajo. Se comprueba que los modos observados resultan del acoplamiento de largo alcance de los momentos dipolares asociados a las nanopartículas de la red. Es importante destacar que es posible desacoplar la interacción entre las subredes y analizarlas por separado, así las interacciones entre estas representan la propiedad distintiva real de las redes que no son de Bravais. Finalmente, las SLR dipolares muestran características de campo cercano y lejano muy similares a las que muestran redes similares con nanopartículas más grandes, demostrando la eficiencia del modelo de dipolos acoplados ya que no existe necesidad de invocar momentos multipolares de mayor orden.

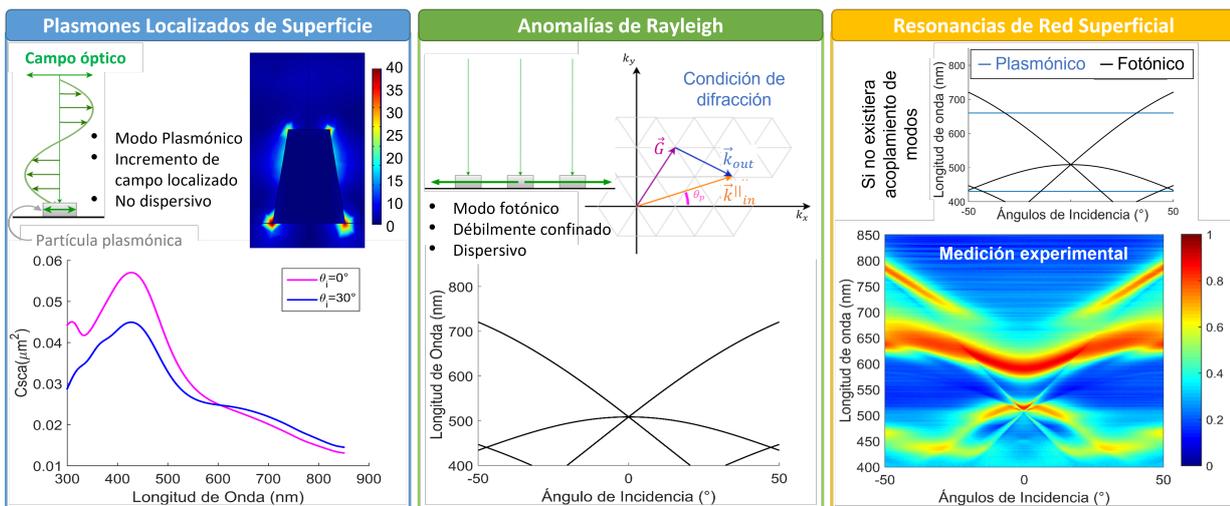


Figura 1.1: Esquema de acoplamiento de resonancias en un cristal plasmónico [17].

Teoría del Electromagnetismo

2.1. Introducción

Históricamente, la teoría del electromagnetismo de Maxwell se basó en las leyes básicas disponibles de su época, siendo su contribución más importante el completar la ley de Amperè con un término ahora famoso, llamado corriente de desplazamiento para hacerlo compatible con la ecuación de continuidad y con la ley de Gauss. Sin embargo, hoy en día es más práctico presentar la teoría en su forma completa, haciendo énfasis en clasificar las ecuaciones dependientes de las independientes del conjunto completo de ecuaciones, así como comprender el significado de la forma definida en contraste con la forma indefinida, como se aborda en la referencia [18]. Asimismo, es necesario discutir las condiciones de frontera que deben postularse en la teoría electromagnética si consideramos las ecuaciones diferenciales de Maxwell como fundamento de su teoría. De esta manera, queda establecido el procedimiento para proceder en la resolución de las ecuaciones de Maxwell y su aplicación en problemas físicos como es el caso de la interacción luz-materia.

Es este capítulo se abordarán el formalismo físico-matemático de las ecuaciones de Maxwell, así como la implementación de este formalismo en el estudio del problema de campos electromagnéticos con diferentes condiciones de frontera. El desarrollo matemático y los principales resultado de esta sección nos proporcionara las herramientas necesarias para abordar los problemas de la interacción con partículas a la nanoescala.

2.2. Ecuaciones del electromagnetismo

Las ecuaciones de Maxwell consisten en un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales acopladas de primer orden que relacionan las componentes del campo eléctrico y del campo magnético. En la teoría del Electromagnetismo de Maxwell se pueden clasificar al conjunto de ecuaciones en independientes y las ecuaciones dependientes. Las **ecuaciones independientes** en el Sistema Internacional de Unidades son:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{Ley de Faraday}) \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}_{ext}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{Ley Amperè - Maxwell}) \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{Ecuación de continuidad}) \quad (2.3)$$

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

donde

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \text{Campo eléctrico } [V/m] \\ \mathbf{D} &= \text{Densidad de flujo eléctrico } [C/m^2] \\ \mathbf{H} &= \text{Campo magnético } [A/m] \\ \mathbf{B} &= \text{Densidad de flujo magnético } [Wb/m^2] \\ \mathbf{J} &= \text{Densidad de corriente eléctrica } [A/m^2] \\ \rho &= \text{Densidad de carga eléctrica } [C/m^3] .\end{aligned}$$

Cabe remarcar que la denominación “*ext*” hace referencia a la clasificación de fuentes de campo en las definiciones:

$$\rho = \rho_{ind} + \rho_{ext} \quad \mathbf{J} = \mathbf{J}_{ind} + \mathbf{J}_{ext} , \quad (2.4)$$

de tal manera que clasificamos **las fuentes externas** ρ_{ext} , \mathbf{J}_{ext} **como cargas o corrientes sobre las que mantenemos cierto grado de control** y, por otra parte, identificamos a **las fuentes de campo inducidas** ρ_{ind} , \mathbf{J}_{ind} **a las generadas por la polarización del material y que, por lo tanto, no puede ser removidas libremente.**

Las ecuaciones (2.1) - (2.3) se pueden considerar independientes debido a que de ellas se pueden derivar las demás ecuaciones. Por ejemplo, si se toma la divergencia de la ecuación (2.1) y se considera la constante de integración con respecto al tiempo igual a cero, se obtiene:

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{Ley de Gauss magnética.} \quad (2.5)$$

De manera similar, tomando la divergencia de (2.2) y sustituyendo (2.3) para eliminar \mathbf{J}_{ext} de la ecuación resultante, se obtiene:

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho_{ext}(\mathbf{r}, t) \quad \text{Ley de Gauss.} \quad (2.6)$$

Mientras (2.5) y (2.6) son consideradas como ecuaciones que se derivan de (2.1) - (2.3), estas dos ecuaciones se consideran auxiliares o **ecuaciones dependientes** en el sistema completo de ecuaciones de Maxwell.

Las tres ecuaciones independientes descritas en (2.1) - (2.3) en realidad consisten en siete ecuaciones diferenciales escalares acopladas, ya que una ecuación vectorial es equivalente a tres ecuaciones escalares. Dado que cada función vectorial tiene tres componentes, por tanto, el conjunto de solución consiste en 16 funciones escalares desconocidas en total, observación matemática señalada explícitamente en la referencia [18], de la cual extraemos la mayoría de los fundamentos de la función de Green descritos en este trabajo. Continuando con la teoría, con base en las 16 funciones escalares a resolver, es obvio que las tres ecuaciones independientes no son suficientes para formar un sistema completo de ecuaciones para resolver las funciones desconocidas. Para mayor claridad, designaremos (2.1) - (2.3) como **ecuaciones de Maxwell en forma indefinida** siempre que se desconozcan o no se especifiquen las relaciones constitutivas entre las cantidades del campo. Bajo tal condición, se pueden usar muchas formas alternativas para describir la teoría de Maxwell. Una forma común es introducir dos vectores de campo material, \mathbf{P} y \mathbf{M} , que están definidos por medio de la relación:

$$\mathbf{J}_{ind}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) . \quad (2.7)$$

De esta manera al sustituir en las ecuaciones de Maxwell, se obtienen las relaciones:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \quad (2.8)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 [\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{M}(\mathbf{r}, t)] \quad (2.9)$$

donde

$$\mathbf{P} = \text{Polarización } [C/m^2]$$

$$\mathbf{M} = \text{Magnetización } [A/m]$$

$$\epsilon_0 = \text{permitividad eléctrica de vacío} = 8.854 \times 10^{-12} [F/m]$$

$$\mu_0 = \text{permeabilidad magnética del vacío} = 4\pi \times 10^{-7} [H/m]$$

Cuando se utilizan \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{P} y \mathbf{M} , el número de incógnitas y el número de ecuaciones permanecen iguales y las características esenciales de las ecuaciones de Maxwell no se alteran. Esta es la propiedad invariante de las ecuaciones de Maxwell. En cualquier caso, para definir la ecuación de Maxwell necesitamos más información. Esta información adicional es proporcionada por las relaciones constitutivas entre las cantidades de campo. Para introducir dichas relaciones de una forma sencilla es conveniente realizar un análisis en el espacio de frecuencias de los campos.

Transformada de Fourier

En general, una función $f(\mathbf{r}, t)$, en términos de su transformada de Fourier con respecto a la coordenada temporal, está dada por:

$$f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (2.10)$$

donde se observa que la frecuencia ω corresponde a la variable conjugada de la variable temporal t . Además, se especifica que la función f puede representar a una componente de los campos vectoriales \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{P} , \mathbf{M} y \mathbf{J}_{ext} , o bien, a la función escalar ρ_{ext} . Cabe remarcar que la existencia de $\tilde{f}(\mathbf{r}, \omega)$ requiere que la función $f(\mathbf{r}, t)$ debe:

1. A lo más, debe tener una cantidad finita de discontinuidades durante un intervalo finito de t .
2. Dado un punto cualquiera del espacio de coordenadas espaciales \mathbf{r} , el valor de la función en dicho punto debe ser acotado en un intervalo de tiempo definido, de tal manera que cuando se realice la integración de la función con respecto al tiempo, en el punto \mathbf{r} , el resultado de la integral sea finito. Esto último, matemáticamente se describe por medio de la expresión

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(\mathbf{r}, t)| dt < \infty.$$

Para trasladarnos al espacio de frecuencias, es útil observar que las ecuaciones (2.1) y (2.6) principalmente se efectúan principalmente dos tipos de operaciones diferenciales sobre los campos: operadores que actúan sobre coordenadas espaciales $\nabla \left\{ \begin{matrix} \times \\ \cdot \end{matrix} \right\}$ y la derivada con respecto al tiempo $(\frac{\partial}{\partial t})$. Analizando el efecto de cada una de estas operaciones por separado, al sustituir la expresión

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

términos de las transformadas de Fourier (2.10) se observa que:

1. Como el operador $\nabla \left\{ \begin{matrix} \times \\ \cdot \end{matrix} \right\}$ opera sobre las coordenadas espaciales \mathbf{r} , este puede ingresar en la integral con respecto a la frecuencia ω que se efectúa en la representación de Fourier. Explícitamente:

$$\nabla \left\{ \begin{matrix} \times \\ \cdot \end{matrix} \right\} \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \nabla \left\{ \begin{matrix} \times \\ \cdot \end{matrix} \right\} [\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, \omega)] e^{-i\omega t} d\omega. \quad (2.11)$$

2. Aplicando directamente la derivada temporal sobre la función y advirtiendo que la integral en la representación de Fourier se realiza con respecto de la frecuencia ω , se tiene que la derivada temporal puede ingresar en la integral de ω , obteniéndose así:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} -i\omega \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (2.12)$$

De esta manera, usando los resultados en (2.11) y (2.12), al sustituir la representación de Fourier en las ecuaciones (2.1) y (2.2) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} i\omega \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \left\{ \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) \right\}. \end{aligned}$$

Multiplicando por $e^{i\omega' t}$ e integrando con respecto al tiempo se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega' - \omega)t} \right\} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega i\omega \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega' - \omega)t} \right\} \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega' - \omega)t} \right\} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) \right] \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega' - \omega)t} \right\} \end{aligned}$$

De esta manera, usando la definición de la delta de Dirac en su forma integral

$$\delta(\omega - \omega') = \delta(\omega' - \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega' - \omega)t} dt$$

se tiene que: $\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega') = i\omega' \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega')$ $\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega') = \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega') - i\omega' \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega')$

El procedimiento de la representación de Fourier también se puede aplicar a las ecuaciones (2.5) y 2.6 de manera similar. Por lo tanto, renombrando la variable $\omega' \rightarrow \omega$ se obtiene:

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.13)$$

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.14)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (2.15)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\rho}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.16)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \tilde{\rho}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.17)$$

para cualquier ω . Recordemos que el propósito de realizar el análisis de los campos en el espacio de frecuencias fue motivado en pro de la introducción de las **relaciones constitutivas** entre los

campos. Por ejemplo, en un **medio lineal, isotrópico y homogéneo**, las cantidades de campo se relacionan de la siguiente manera:

$$\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) = \epsilon_0 \tilde{\chi}_e(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \Rightarrow \boxed{\tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.18)$$

$$\tilde{\mathbf{M}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\chi}_m(\omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) \Rightarrow \boxed{\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.19)$$

$$\boxed{\tilde{\mathbf{J}}_{ind}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\sigma}(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)}, \quad (2.20)$$

donde $\tilde{\epsilon}$ y $\tilde{\mu}$ denotan, respectivamente, la permitividad y la permeabilidad del medio en el cual que encuentran embebidas la fuentes externas, región que se suele denominar en la literatura con el nombre de matriz. Por otra parte, $\tilde{\sigma}$ denota la conductividad dentro los materiales polarizables, es decir, en las regiones donde se producirán fuentes inducidas.

Las relaciones (2.18) - (2.20) proporcionan nueve relaciones escalares que se anexan al conjunto de ecuaciones, de tal manera que el conjunto de ecuaciones se hace compatibles con el número de incógnitas. Consecuentemente, sustituyendo explícitamente las relaciones constitutivas en las ecuaciones (2.14) - (2.16) se obtiene:

$$\boxed{\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.21)$$

$$\boxed{\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.22)$$

$$\boxed{\nabla \cdot [\tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)] = 0} \quad (2.23)$$

$$\boxed{\nabla \cdot [\tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)] = \tilde{\rho}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.24)$$

$$\boxed{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \tilde{\rho}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.25)$$

$$\boxed{-\nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\rho}_{ind}(\mathbf{r}, \omega)}. \quad (2.26)$$

Por tanto, cuando se conocen las relaciones constitutivas entre las cantidades de campo, las ecuaciones de Maxwell se vuelven definidas. Más aún, en este punto del análisis es conveniente remarcar que al añadir condiciones de frontera se puede disminuir la restricción de medio homogéneo impuesta en las relaciones constitutivas. Esto último se debe a que la solución obtenida para un medio homogéneo puede ser extendido a un problema de varias regiones, diferentes entre sí por sus propiedades óptica. Por tal motivo, uno se puede concentrar en resolver el problema del medio homogéneo y considerarlo como un cimiento para soluciones de sistemas más complejos.

Posteriormente, al definir las propiedades ópticas de las diferentes regiones se establece un problema de valores en la frontera, en las cuales las relaciones constitutivas entre $\tilde{\mathbf{D}}$, $\tilde{\mathbf{B}}$, $\tilde{\mathbf{E}}$ y $\tilde{\mathbf{H}}$ se conocen y, por lo cual, la función de densidad de corriente $\tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)$ se trata como un término fuente. De esta manera, en el presente trabajo se enfocó en las soluciones para $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ y $\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)$ en términos de $\tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)$ y cuyas expresiones satisfagan ciertas condiciones de contorno.

Por otra parte, para obtener expresiones más sencilla de manipular, es conveniente calcular el rotacional de la ecuación (2.21) y desarrollar el rotacional aplicado a $\tilde{\mu} \tilde{\mathbf{H}}$, lo cual da como

resultado:

$$\begin{aligned} \nabla \times [\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)] &= i\omega \left\{ \nabla [\tilde{\mu}(\omega)]^0 \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) + \tilde{\mu}(\omega) \nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) \right\} \\ \Rightarrow \nabla \times [\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)] &= i\omega \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) + \omega^2 \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega), \end{aligned} \quad (2.27)$$

donde se substituyó la ecuación (2.22) para obtener la expresión (2.27).

De manera análoga, para obtener una expresión más sencilla de manipular de (2.22), es conveniente calcular el rotacional de dicha ecuación y desarrollar el rotacional aplicado a $\tilde{\epsilon} \tilde{\mathbf{E}}$, lo cual da como resultado:

$$\begin{aligned} \nabla \times [\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)] &= \nabla \times \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \left\{ \nabla [\tilde{\epsilon}(\omega)]^0 \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + \tilde{\epsilon}(\omega) \nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \right\}. \\ \nabla \times [\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)] &= \nabla \times \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) + \omega^2 \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega), \end{aligned} \quad (2.28)$$

donde se ha substituido la ecuación (2.21) para obtener la expresión (2.28).

Por lo tanto, organizando los términos de (2.27) y (2.28) se obtiene:

$$\boxed{\nabla \times [\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)] - k^2 \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.29)$$

$$\boxed{\nabla \times [\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)] - k^2 \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.30)$$

$$\text{donde } \boxed{k^2 = \omega^2 \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mu}(\omega)} \quad (2.31)$$

Para fines de identificación, las ecuaciones del tipo (2.29) o (2.30) se designarán con el nombre de **ecuaciones de ondas vectoriales no homogéneas**. Todo el tema de la técnica diádica de Green se desarrolla principalmente para encontrar las soluciones para este tipo de ecuación bajo la restricción de diferentes condiciones de contorno. Cuando el dominio bajo consideración es infinito, hay varios métodos distintos para encontrar la solución para (2.29) o (2.30). El método clásico de los potenciales se revisa en la siguiente sección. Una vez solucionado los potenciales comenzaremos nuestra discusión sobre la técnica de función de Green y función de Green diádica basada en esta solución clásica.

2.2.1. Potenciales

Partiendo de la ecuación (2.23) y usando la identidad vectorial $\nabla \cdot [\nabla \times \tilde{\mathbf{A}}] = 0$, podemos definir un **potencial vectorial** $\tilde{\mathbf{A}}$ tal que:

$$\boxed{\tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega)}. \quad (2.32)$$

Más aún, substituyendo (2.32) en la ecuación (2.21) se tiene:

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \left(\tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) \right) = i\omega \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) \Rightarrow \nabla \times [\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega)] = 0.$$

Por otra parte, usando la identidad diferencial $\nabla \times [\nabla \tilde{\Phi}] = 0$, se puede definir al **potencial escalar** $\tilde{\Phi}$ tal que:

$$\boxed{\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) - \nabla \tilde{\Phi}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.33)$$

Sustituyendo (2.32) y (2.33) en (2.22), se obtiene:

$$\begin{aligned} -\nabla^2 \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) + (\nabla \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) &= \nabla \times [\nabla \times \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega)] = \nabla \times [\tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)] = \tilde{\mu}(\omega) \nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) \\ &= \tilde{\mu}(\omega) \left\{ \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \right\} = \tilde{\mu}(\omega) \left\{ \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \tilde{\epsilon}(\omega) (i\omega \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) - \nabla \tilde{\Phi}(\mathbf{r}, \omega)) \right\} \\ &= \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) + \omega^2 \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) + i\omega \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\epsilon}(\omega) \nabla \tilde{\Phi}(\mathbf{r}, \omega), \end{aligned}$$

en resumen

$$-\nabla^2 \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) + (\nabla \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega) + k^2 \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) + i\omega \tilde{\mu}(\omega) \tilde{\epsilon}(\omega) \nabla \tilde{\Phi}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.34)$$

Con el resultado en (2.34) hemos reducido el conjunto de las ecuaciones vectoriales de onda de Maxwell a una ecuación acoplada para los potenciales. El desacoplamiento se puede lograr explotando la arbitrariedad involucrada en la definición de los potenciales, es decir, usando la libertad de norma que cumplen los potenciales. En general, si definimos a los potenciales $\tilde{\mathbf{A}}'$ y $\tilde{\Phi}'$ en términos de los potenciales iniciales de la forma:

$$\tilde{\mathbf{A}} \rightarrow \tilde{\mathbf{A}}' = \tilde{\mathbf{A}} + \nabla \tilde{\Lambda} \quad (2.35)$$

$$\tilde{\Phi} \rightarrow \tilde{\Phi}' = \tilde{\Phi} - \frac{\partial \tilde{\Lambda}}{\partial t}, \quad (2.36)$$

donde $\tilde{\Lambda}$ es una función escalar cualquiera con la única condición que su gradiente y su derivada temporal estén bien definidos, se puede observar que los campos $\tilde{\mathbf{E}}$ y $\tilde{\mathbf{H}}$ se mantienen invariantes ante dichas transformaciones [19]. En consecuencia, la libertad implicada en (2.35) y (2.36) nos permiten elegir el conjunto de potenciales $(\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\Phi})$ a conveniencia para satisfacer diferentes condiciones. En particular, para simplificar la relación en (2.34), podríamos definir el potencial vectorial tal que:

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{A}} = i\omega \tilde{\epsilon} \tilde{\mu} \tilde{\Phi} \quad (\text{Norma de Lorentz}) \quad (2.37)$$

De esta manera, el término relacionado a $\tilde{\Phi}$ se eliminan de ambos lados de la igualdad de (2.34), reduciendo la expresión a:

$$\boxed{\nabla^2 \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) + k^2 \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) = -\tilde{\mu}(\omega) \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)} \quad (2.38)$$

En contraste con las ecuaciones de onda vectorial en (2.29), la ecuación (2.38) se puede interpretar como una **ecuación de Helmholtz** para cada una de las componentes del potencial vectorial $\tilde{\mathbf{A}}$.

Por otra parte, el potencial escalar $\tilde{\Phi}$ se puede resolver calculando la divergencia de (2.38) y usando la condición de norma (2.37) junto con la ecuación (2.17), de las cuales se obtiene:

$$\boxed{\nabla^2 \tilde{\Phi}(\mathbf{r}, \omega) + k^2 \tilde{\Phi}(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{\tilde{\rho}_{ext}(\mathbf{r}, \omega)}{\tilde{\epsilon}(\omega)}} \quad (2.39)$$

Las ecuaciones (2.39) y (2.38), junto con la relación (2.37), forman un conjunto de ecuaciones

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

equivalentes en todos los aspectos a las ecuaciones de Maxwell en medios lineales. De esta manera, el problema se resume a calcular $\tilde{\Phi}(\mathbf{r}, \omega)$ y $\tilde{A}_\alpha(\mathbf{r}, \omega)$, ($\alpha = 1, 2, 3$) para un conjunto de fuentes carga $\tilde{\rho}_{ext}(\mathbf{r}, t)$ y fuentes de corriente $\tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}, t)$ dados. Más aún, es posible observar que las ecuaciones (2.39) y (2.38) tienen la misma estructura básica, es decir, son de la forma:

$$\boxed{\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, \omega) + k^2 \Psi(\mathbf{r}, \omega) = -f(\mathbf{r}, \omega)}, \quad (2.40)$$

donde $f(\mathbf{r}, \omega)$ es conocido y, por lo cual, puede interpretarse como la **ecuación de Helmholtz escalar**. Ahora bien, como se demostrará en secciones posteriores, a través de la solución de la ecuación (2.40) es posible resolver las ecuaciones (2.39) y (2.38) de tal manera que, si se consideran ondas que divergen desde las fuentes de carga y de corriente, las soluciones de los potenciales estarán dadas por:

$$\boxed{\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \mu_0 \iiint \tilde{\mathbf{J}}_{ext}(\mathbf{r}') G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d^3 r'}, \quad (2.41)$$

$$\boxed{\tilde{\Phi}(\mathbf{r}') = \frac{1}{\epsilon_0} \iiint \tilde{\rho}_{ext}(\mathbf{r}') G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d^3 r'}, \quad (2.42)$$

donde $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ corresponde a la **función de Green de la ecuación de Helmholtz escalar**, con \mathbf{r}' que denota la posición de la fuente puntual y \mathbf{r} denota la posición donde se observa al campo. También, cabe remarcar que el subíndice “ k ” en la notación G_k lo usaremos para representar la condición de **espacio libre** caracterizada por la relación $k^2 = \omega^2 \epsilon(\omega) \mu(\omega)$, lo cual implica condición de **medio homogéneo**.

Posteriormente, una vez que conocemos la solución para $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega)$, se pueden calcular el campo eléctrico $\tilde{\mathbf{E}}$ y el campo magnético $\tilde{\mathbf{H}}$ en el espacio libre. Partiendo de la expresión del campo eléctrico en términos de los potenciales (2.33) y usando la relación (2.37) para expresar al potencial $\tilde{\Phi}$ en términos del potencial vectorial $\tilde{\mathbf{A}}$, se tiene:

$$\boxed{\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \left(1 + \frac{1}{k^2} \nabla(\nabla \cdot) \right) \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega)}, \quad (2.43)$$

mientras que para el caso del campo magnético, de la relación (2.32), se obtiene directamente que:

$$\boxed{\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{\mu} \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega)}. \quad (2.44)$$

Por lo tanto, las ecuaciones (2.43) y (2.44) demuestran que tanto el campo eléctrico $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ como el campo magnético $\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)$ se puede resolver en términos de la solución del potencial vectorial. Dicha solución del potencial se puede obtener al resolver la ecuación de Helmholtz, para lo cual es necesario indagar en el campo matemático de las ecuaciones diferenciales.

2.2.1.1. Marco teórico de la Teoría de ecuaciones diferenciales

Para resolver formalmente la ecuación de Helmholtz, es necesario recurrir a la teoría de las ecuaciones diferenciales. En referencia a esta rama de estudio de las matemáticas, en la Figura 2.1 se muestra un esquema con algunas definiciones útiles en la teoría de ecuaciones diferenciales.

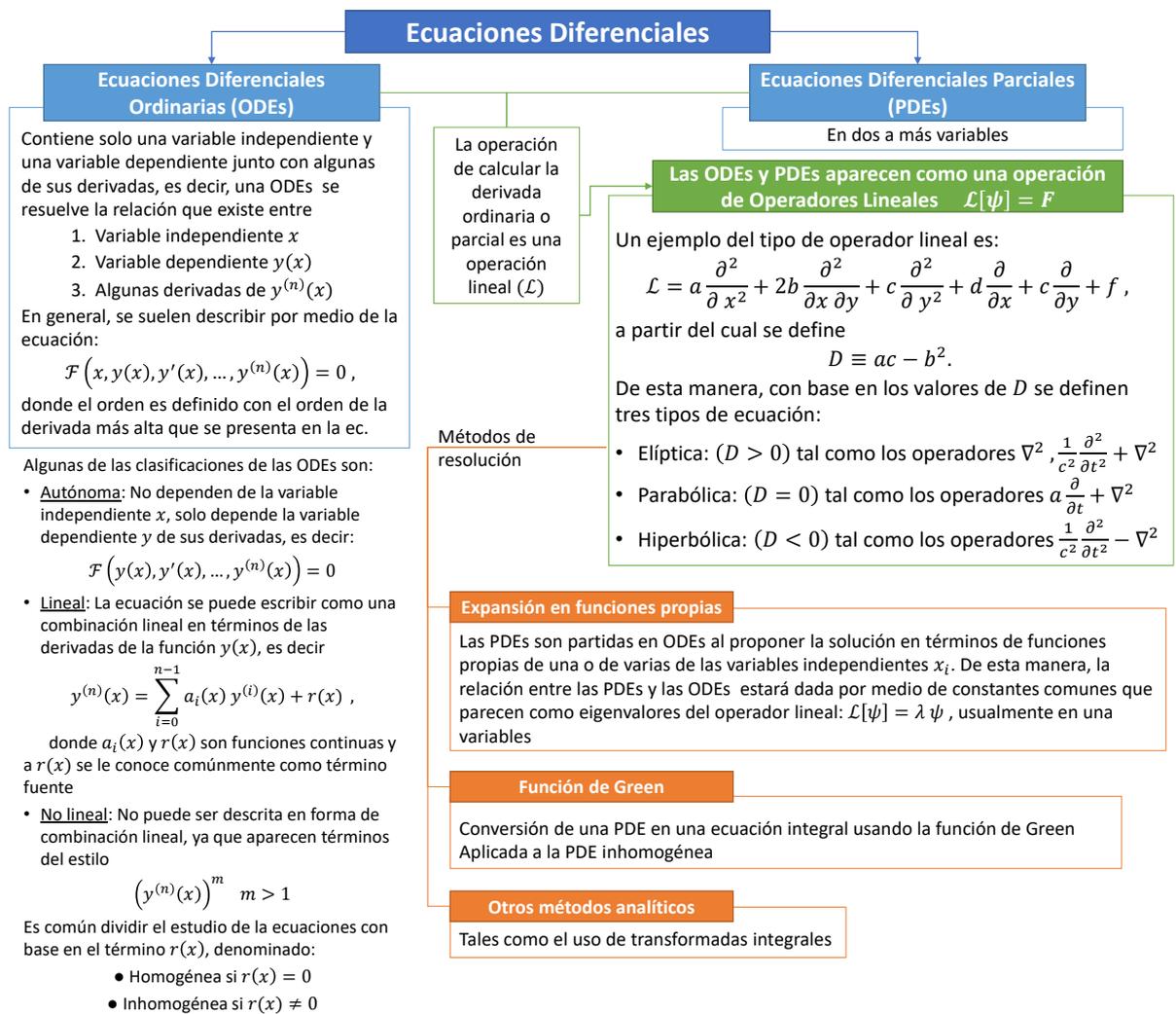


Figura 2.1: Teoría de ecuaciones diferenciales

En el presente trabajo se usó tanto el método de la función de Green como el método de expansión en funciones propias para resolver las ecuaciones diferenciales dadas en (2.38) y (2.39). El procedimiento en la implementación del método de función de Green se detalla en la sección inmediata; mientras que en secciones posteriores se implementará el método de expansión en funciones propias para expresar la función de Green en coordenadas esféricas. Este último resultado servirá para abordar la solución de Mie, es decir, para el estudio del esparramiento de luz por partículas pequeñas.

Por otra parte, como es bien conocido en la teoría de ecuaciones diferenciales, la solución a la ecuación diferencial no está completamente determinada a menos que satisfaga las condiciones de frontera que definen al sistema. Desde un punto de vista matemático, estas condiciones pueden clasificarse de tres diferentes formas:

- (I) **Condiciones de contorno de Cauchy.** El valor de una función y derivada normal se

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

especifica en la frontera.

- (II) **Condiciones de contorno de Dirichlet.** El valor de una función especificada en la frontera.
- (III) **Condiciones de contorno de Neumann.** La derivada normal (gradiente normal) de una función especificada en la frontera.

En general, el tipo de ecuación diferencial (parcial) junto con las condiciones de frontera del problema, determinaran el tipo de soluciones permitidas, como se ejemplifica en la tabla (2.1) para el casos 2-dimensional.

Condición de Frontera	Tipo de ecuación diferencial parcial		
	Elíptica	Hiperbólica	Parabólica
	Laplace, Poisson (x, y)	Ecuación de Onda (x, t)	Ecuación de Difusión (x, t)
Cauchy			
Superficie abierta	Resultados no físicos (inestable)	Solución única y estable	Demasiado restrictiva
Superficie cerrada	Demasiado restrictiva	Demasiado restrictiva	Demasiado restrictiva
Dirichlet			
Superficie abierta	Insuficiente	Insuficiente	Solución única y estable en 1-dimensión
Superficie cerrada	Solución única y estable	Solución no única	Demasiado restrictiva
Neumann			
Superficie abierta	Insuficiente	Insuficiente	Solución única y estable en 1-dimensión
Superficie cerrada	Solución única y estable	Solución no única	Demasiado restrictiva

Tabla 2.1: Resolución de ecuaciones diferenciales parciales, extraído de la referencia [20]

En consecuencia, dado que los valores a la frontera son esenciales para resolver el problema, las funciones de Green deben ser clasificadas según las condiciones de frontera que obedecen. En primera instancia, para resolver (2.40) es útil considerar el caso simple sin superficies de fronteras. Este primer tipo de condición de frontera corresponde a la **condición de radiación o de dominio infinito**, en el cual se tienen **ondas salientes** que tienden a cero cuando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ y la respuesta de $\tilde{\epsilon}$ y/o $\tilde{\mu}$ tienen una parte imaginaria positiva.

En este trabajo, nos concentraremos primero en calcular la función de Green de la relación (2.45) y posteriormente abordaremos las condiciones de contorno.

2.3. Función de Green para la ecuación de Helmholtz escalar

Para el tipo de ecuación (2.40), en la teoría de las ecuaciones diferenciales se ha desarrollado el método de la función de Green, el cual permite resolver la ecuación de una forma bastante elegante. Este método tiene una analogía en la teoría de circuitos mediante la cual la respuesta de una red a cualquier función de entrada puede determinarse mediante una integración basada

en la respuesta de impulso de la red. De esta manera, la función de Green para un problema espacial juega el mismo papel que la función de respuesta de impulso en un problema en el dominio del tiempo. Para problemas de campos transitorios, la función de Green puede construirse para incluir también las características de tiempo impulsivo.

Para el caso que concierne a este trabajo, como se comprobó en la sección anterior, usar la representación de las funciones en términos de su transformada de Fourier nos permite remover la dependencia explícita en el tiempo y, en consecuencia, se puede definir **la función Green escalar independiente del tiempo** $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ asociada a la ecuación (2.40), la cual satisface la ecuación inhomogénea:

$$\boxed{(\nabla^2 + k^2) G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad , \quad (2.45)$$

donde $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ representa a la función delta de dirac.

Función delta de dirac

La función delta de dirac d -dimensional se puede definir como

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \prod_{\alpha=1}^d \delta(x_\alpha - x'_\alpha) \quad \text{con} \quad (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d. \quad (2.46)$$

Para un sistema de coordenadas curvilíneo, la función delta de dirac puede ser obtenida explotando la relación que debe existir entre las coordenadas ξ_β y x_α vía el Jacobiano $J(x_\beta, \xi_\alpha)$, donde la cantidad significativa a obtener es $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')d^d r$. Entonces:

$$\boxed{\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{|J(x_\alpha, \xi_\beta)|} \prod_{\gamma=1}^d \delta(\xi_\gamma - \xi'_\gamma)} \quad \text{tal que} \quad \boxed{\int_{B_\varepsilon^d(\mathbf{r}')} \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) d\Omega_d(\mathbf{r}) = 1} \quad , \quad (2.47)$$

donde d = dimensión del espacio de coordenadas “espaciales”, $B_\varepsilon^d(\mathbf{r}')$ =bola abierta d -dimensional, centrada en \mathbf{r}' con radio ε . Particularmente se tiene:

$$\begin{aligned} \text{Unidimensional: } \delta(x - x') &\rightarrow \delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq(x-x')} dq \\ \text{Bidimensional: } \frac{\delta(r-r')}{r} &\rightarrow \frac{\delta(r-r')}{r^2} = \int_0^\infty J_n(\lambda r) J_n(\lambda r') \lambda d\lambda \\ \text{Tridimensional: } \frac{\delta(r-r')}{r^2} &\rightarrow \frac{\delta(r-r')}{r^2} = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty j_n(\lambda r) j_n(\lambda r') \lambda^2 d\lambda \end{aligned} \quad (2.48)$$

La interpretación física de (2.45) se puede dilucidar si en la ecuación (2.40) sustituimos:

$$\tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.49)$$

de esta manera se reduce a la ecuación (2.45), lo cual deslumbra la interpretación de $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ con el potencial producido por una fuente puntual localizada en la posición \mathbf{r}' .

Ahora bien, para contemplar la utilidad de la función de Green en la resolución de la ecuación de Helmholtz escalar (2.40) es necesario manipular las expresiones. En general, si multiplicamos (2.40) por la función de Green $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ y la ecuación (2.49) por la función $\tilde{f}(\mathbf{r}, \omega)$ y calculamos la diferencia entre las ecuaciones resultantes, se obtiene:

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \nabla^2 G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) = - \left\{ \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) \right\} .$$

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

Integrando ambos lados de la ecuación en el dominio de \mathbf{r} se tiene:

$$\int_{B_\varepsilon^d(\mathbf{r}')} \left[\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \nabla^2 G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \right] d\Omega_d(\mathbf{r}) \\ = - \left\{ \int_{B_\varepsilon^d(\mathbf{r}')} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\Omega_d(\mathbf{r}) - \int_{B_\varepsilon^d(\mathbf{r}')} G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) d\Omega_d(\mathbf{r}) \right\}.$$

Al efectuar la integración, el primer término de lado derecho de la igualdad es simplemente $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}', \omega)$, mientras que el término del lado derecho se puede simplificar usando la Segunda identidad de Green. De esta manera, intercambiando \mathbf{r} por \mathbf{r}' para reescribir el resultado final, se obtiene:

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) = \int_{B_\varepsilon^d(\mathbf{r})} G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{f}(\mathbf{r}', \omega) d\Omega_d(\mathbf{r}') - \underbrace{\oint_{\delta B_\varepsilon^d(\mathbf{r})} \left[\tilde{\Psi}(\mathbf{r}', \omega) \frac{\partial G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} - G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \tilde{\Psi}(\mathbf{r}', \omega)}{\partial n'} \right] d\Omega_{d-1}(\mathbf{r}')}_{\text{Condiciones de Frontera}} \quad (2.50)$$

Como se ha remarcado en la relación (2.50), las condiciones de frontera, tanto de la función de Green $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ como las del potencial $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}', \omega)$, son fundamentales en la resolución del problema. De esta manera, se resalta que la solución $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ que satisface (2.40) no está completamente determinada a menos que especifiquemos las condiciones de contorno que debe satisfacer en del dominio espacial. A su vez, se observa que $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ depende del tipo de condiciones de frontera que satisface el potencial $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega)$. Por otra parte, si se imponen las condiciones:

$$\boxed{\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \pm\infty} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \pm\infty} G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0} \quad (2.51)$$

y se considera que el volumen de integración se puede hacer infinitamente grande, entonces, la integral de superficie en la ecuación (2.50) se elimina, de tal manera que se simplifica de la forma:

$$\boxed{\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) = \int_{B_\varepsilon^d(\mathbf{r})} G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{f}(\mathbf{r}', \omega) d\Omega_d(\mathbf{r}')} \quad (2.52)$$

Dado que las condiciones de frontera (2.51) permiten resolver el problema únicamente conociendo la función de Green asociada, serán convenientes en el cálculo de los campos eléctricos y magnéticos. Sin embargo, cabe mencionar que no son las únicas condiciones que se pueden imponer. Por ejemplo, si se considera $G_k(R) = \frac{\exp(ikR)}{R} \Rightarrow \frac{\partial G_k}{\partial n} = \left(ik - \frac{1}{R} \right) \frac{\exp(ikR)}{R} \approx ik G_k$ con $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ al sustituir en la integral de condiciones de frontera en (2.50) se obtiene:

$$\oint \left[G_k \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial n} - \tilde{\Psi} \frac{\partial G_k}{\partial n} \right] d\Omega \approx \oint G_k \left[\frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial n} - ik \tilde{\Psi} \right] R^2 d\Omega, \quad \text{así si} \quad \boxed{\lim_{R \rightarrow \infty} R \left(\frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial n} - ik \tilde{\Psi} \right) = 0} \quad (2.53)$$

se reproduce la integral (2.52). A la condición en (2.53) se le conoce con el nombre de **condición de radiación de Sommerfeld**. Esta suele ser abordada una vez que se resuelve la función de Green de la ecuación de Helmholtz, ya que requiere que se justifique la elección de la misma. Consecuentemente, con el fin de mantener un orden en el procedimiento, en este punto del análisis se propone comenzar a resolver la función de Green y, posteriormente, imponer las condiciones de fronteras requeridas para resolver los campos electromagnéticos. De esta manera, para continuar con la resolución de la función de Green, que satisface la ecuación de Helmholtz escalar en (2.40),

sustituiremos la Transformada de Fourier con respecto a \mathbf{r} (en coordenadas cartesianas) en ambos lados de la ecuación (2.45). Así, con base en la convención :

$$g_k(\mathbf{q}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\Omega_d(\mathbf{r}) \quad (2.54)$$

$$\Rightarrow G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} g_k(\mathbf{q}, \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\Omega_d(\mathbf{q}), \quad (2.55)$$

se obtiene:

$$\begin{aligned} (\nabla_{\mathbf{r}}^2 + k^2) \left[\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} g_k(\mathbf{q}, \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\Omega_d(\mathbf{q}) \right] &= (\nabla_{\mathbf{r}}^2 + k^2) G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &= -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\Omega_d(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (2.56)$$

donde se ha usado la expresión integral de la delta de dirac, en coordenadas cartesianas para ser consistentes. Por otra parte, procedemos a calcular explícitamente el laplaciano en el primer término de la igualdad (2.56), usando notación de índices.

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}}(e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) &= (\partial_{x_n} e^{-iq^m x_m}) \hat{\mathbf{e}}_n = (e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) \partial_{x_n} (-iq^m x_m) \hat{\mathbf{e}}_n = (e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) (-iq^m \delta_{nm} \hat{\mathbf{e}}_n) \\ &= -i\mathbf{q}(e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) \\ \nabla_{\mathbf{r}}^2(e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (-i\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) = \partial_{x_n} (-iq^n e^{-iq^m x_m}) = (-iq^n) \partial_{x_n} [e^{-iq^m x_m}] \\ &= (-iq^n) [(-iq^m \delta_{nm}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}] = (-iq_n)^2 e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = -q^2 e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \end{aligned}$$

donde se ha establecido que $q = |\mathbf{q}|$. Así, sustituyendo el resultado anterior en la igualdad (2.56) se tiene:

$$\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} (-q^2 + k^2) g_k(\mathbf{q}, \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\Omega_d(\mathbf{q}) = -\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\Omega_d(\mathbf{q}).$$

Multiplicando por $e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}}$ e integrando con respecto a \mathbf{r} de ambos lados de la igualdad.

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} d\Omega_d(\mathbf{q}) (-q^2 + k^2) g_k(\mathbf{q}, \mathbf{r}') \left[\frac{(2\pi)^d}{(2\pi)^{d/2}} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} d\Omega_d(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{q}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \right] &= - \int_{\mathbb{R}^d} d\Omega_d(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \left[\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} d\Omega_d(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\cdot\mathbf{r}} \right] \\ \Rightarrow (2\pi)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} d\Omega_d(\mathbf{q}) (-q^2 + k^2) g_k(\mathbf{q}, \mathbf{r}') \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') &= - \int_{\mathbb{R}^d} d\Omega_d(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \\ \Rightarrow (2\pi)^{d/2} (-q')^2 + k^2) g_k(\mathbf{q}', \mathbf{r}') &= -e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}'} \end{aligned}$$

$$\boxed{g_k(\mathbf{q}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}}{-q^2 + k^2}}. \quad (2.57)$$

Consecuentemente, para calcular explícitamente la función de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ asociada a la ecuación de onda (2.40), es necesario sustituir el resultado (2.57) en (2.55), de donde obtiene que:

$$\Rightarrow \boxed{G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{-q^2 + k^2} d\Omega_d(\mathbf{q})}, \quad (2.58)$$

En este punto del análisis nos enfocaremos en el caso tridimensional $d = 3$. Sin embargo, es claro

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

que el procedimiento que se muestra a continuación puede ser realizado de manera similar para estudiar el caso bidimensional. Para el caso $d = 3$ se tiene:

$$\begin{aligned}
 G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} g_k(\mathbf{q}, \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\Omega_3(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\frac{-1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}}{-q^2 + k^2} \right] e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\Omega_3(\mathbf{q}) \\
 &= \frac{-1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\cos\theta}}{-q^2 + k^2} (q^2 \sin\theta dq d\theta d\phi) = \frac{-1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{q^2}{-q^2 + k^2} \left(\int_{-1}^1 e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|u} du \right) dq \underbrace{\left[\int_0^{2\pi} d\phi \right]}_{2\pi} \\
 &= \frac{-1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{q^2}{-q^2 + k^2} \left[\int_{-1}^1 e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|u} du \right] dq,
 \end{aligned}$$

donde se realizó el cambio de variable $u = \cos\theta$ ($du = -\sin\theta d\theta$) y se reorganizó las integrales para facilitar el cálculo. Posteriormente, se calcula la integral que se encuentra dentro de los corchetes, de donde se obtiene:

$$\int_{-1}^1 e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|u} du = \left. \frac{e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|u}}{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right|_{u=-1}^{u=1} = \frac{1}{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \left(e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right)$$

Sustituyendo el resultado anterior, la función de Green G_k queda expresada en términos de la siguiente integral

$$\begin{aligned}
 G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{-1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{q^2}{-q^2 + k^2} \left[\frac{e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right] dq \\
 &= \frac{-1}{i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \int_0^\infty \frac{dq}{(2\pi)^2} \frac{q \left(e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right)}{-q^2 + k^2} \\
 &= \frac{-1}{i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \left(\int_0^\infty \frac{dq}{(2\pi)^2} \frac{q e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-q^2 + k^2} - \underbrace{\int_0^\infty \frac{dq}{(2\pi)^2} \frac{q e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-q^2 + k^2}}_{q \rightarrow -q} \right) \\
 &= \frac{-1}{i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \left(\int_0^\infty \frac{dq}{(2\pi)^2} \frac{q e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-q^2 + k^2} + \int_{-\infty}^0 \frac{dq}{(2\pi)^2} \frac{q e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-q^2 + k^2} \right) \\
 &= \frac{-1}{i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq}{(2\pi)^2} \frac{q e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-q^2 + k^2} \tag{2.59}
 \end{aligned}$$

La integral en (2.59) debe ser resuelta en el campo de los números complejos, ya que la variable k está definida por medio de la relación $k(\omega) = \omega^2 \tilde{\epsilon}(\omega) \tilde{\mu}(\omega)$ y se puede tener que $\text{Im}[\tilde{\epsilon}(\omega)] \neq 0$ (y/o) $\text{Im}[\tilde{\mu}(\omega)] \neq 0$. Más aún, como se mencionó con anterioridad, la resolución con base en la función de Green requiere de imponer un comportamiento específico de la función $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ y de $\partial G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/\partial n$ en el infinito, comportamiento que puede justificarse si hacemos que k sea complejo con $\text{Im}(k) > 0$, así, con ayuda de este artificio de uso común, se simulan fenómenos de disipación (perdida) por medio de las propiedades ópticas del medio. Consecuentemente, para calcular la integral (2.59) es necesario partir de la Teoría de Variable compleja en general y, después de obtener la expresión final para $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, podemos restaurar la condición sin pérdidas tomando $\text{Im}[k] \rightarrow 0$. Dicho procedimiento también nos ayuda a evaluar la representación integral de $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de una manera relativamente simple.

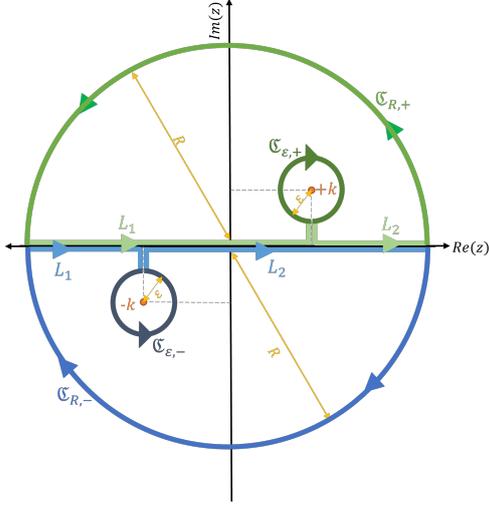


Figura 2.2: Ilustración del contorno de integración para (2.59). Los semicírculos \mathfrak{C}_ε tienen un radio infinitesimal ε , mientras que el semicírculo \mathfrak{C}_R con radio R , de tal manera que los semicírculos \mathfrak{C}_ε están contenidos en \mathfrak{C}_R y la integra evaluada en dicha trayectoria tienda a cero.

En general, considerando $k \in \mathbb{C}$ se pueden localizar los polos del integrando en el plano q como se esquematiza en la Figura 2.2, donde se supone que el contorno de integración está a lo largo del eje real. De esta manera, cuando $Im[k] > 0$, el contorno puede cerrarse por un camino infinito en el semiplano superior sin cambiar su valor; mientras que cuando $Im[k] < 0$, el contorno se puede cerrar en el semiplano inferior. Respetando estos detalles podemos usar el teorema del residuo de Cauchy sobre las integrales de contorno cerradas.

Consecuentemente, para resolver la integral en la expresión de la función de Green, trabajamos la integral en el espacio complejo al evaluar la función con respecto a variables complejas de la forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{q e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-q^2 + k^2} \implies \int dz \frac{z e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-z^2 + k^2},$$

considerando alguno de los contornos de integración que se muestran en la Figura 2.2.

Teorema del Residuo. Sea \mathfrak{C} un contorno simple cerrado definido en sentido positivo. Si una función de variable compleja $f(z)$ es analítica en el interior de \mathfrak{C} , excepto por un número finito de puntos singulares z_k ($k = 1, 2, \dots, n$) en el interior de \mathfrak{C} , entonces

$$\int_{\mathfrak{C}} f(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^n Res_{z=z_k} f(z), \quad (2.60)$$

donde Res hace referencia al cálculo del residuo, el cual se puede determinar con base en el siguiente algoritmo [21].

1. Si $f(z)$ tiene una singularidad removible en z_0

$$Res_{z=z_0} f(z) = 0 \quad (2.61)$$
2. Si $f(z)$ tiene un polo de orden N en z_0 , entonces el residuo se puede calcular por

$$Res_{z=z_0} f(z) = \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{1}{(N-1)!} \frac{d^{N-1}}{dz^{N-1}} [(z-z_0)^N f(z)] \quad (2.62)$$
3. En el caso en particular en que z_0 sea un polo simple ($N = 1$) se tiene

$$Res_{z=z_0} f(z) = \lim_{z \rightarrow z_0} (z-z_0) f(z) \quad (2.63)$$

Ahora bien, dado que el contorno de integración se definió de tal manera que no hay polos en su interior, la función es analítica en el interior de la región de integración y por lo tanto la integral

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

es igual a cero, como indica (2.61). En consecuencia, se tiene que:

$$\left\{ \int_{L_1} + \int_{L_2} \right\} \frac{z e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-z^2 + k^2} dz = - \left\{ \int_{\mathfrak{C}_{\varepsilon,+}} + \int_{\mathfrak{C}_{R,\pm}} \right\} \frac{z e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-z^2 + k^2} dz, \quad (2.64)$$

donde se ha despreciado de manera explícita la contribución de los segmentos de integración verticales ya que, al tener sentido opuestos entre sí, su contribución se anula.

De la representación polar, para los segmentos de recta se tiene que $z = \rho e^{i\theta} = \rho$ ($z \in L_1 \cup L_2$), por lo que e integrando en los segmentos de recta queda expresado como $f(z)|_L = \frac{\rho e^{i\rho|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-\rho^2 + k^2}$.

Por otra parte, la integración alrededor de los circuitos $\mathfrak{C}_{\varepsilon,\pm}$ se puede realizar usando el teorema de Cauchy, de donde se obtendría que:

$$\int_{\mathfrak{C}_{\varepsilon,-}} f(z) dz = 2i\pi \operatorname{Res}_{z=k} f(z) \quad ; \quad \int_{\mathfrak{C}_{\varepsilon,+}} f(z) dz = -2i\pi \operatorname{Res}_{z=-k} f(z), \quad (2.65)$$

donde el cambio de signo en el residuo de la integral $\mathfrak{C}_{\varepsilon,+}$ se debe a que el contorno de integración en ese caso está descrito en sentido negativo (sentido horario). Consecuentemente, calculando explícitamente los residuos correspondientes:

$$\operatorname{Res}_{z=\pm k} f(z) = \lim_{z \rightarrow \pm k} (z \mp k) \frac{z e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-(z-k)(z+k)} = \lim_{z \rightarrow \pm k} \frac{z e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-(z \pm k)} = \frac{\pm k e^{\pm i k |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{\mp 2k} = -\frac{1}{2} e^{\pm i k |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (2.66)$$

Ahora bien, para calcular la integral en el semicírculo \mathfrak{C}_R partimos del hecho que

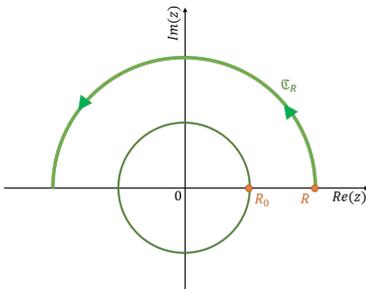
$$|-z^2 + k^2| \geq |\operatorname{Re}(-z^2 + k^2)| \underset{k \ll R}{\geq} R^2 \quad \implies \quad \frac{1}{|-z^2 + k^2|} \leq \frac{1}{R^2}.$$

En consecuencia, se tiene que: $|g(z)| = \left| \frac{z}{-z^2 + k^2} \right| \leq \frac{R}{R^2} = \frac{1}{R} = M_R,$

donde es evidente que $\lim_{R \rightarrow \infty} M_R = 0$ y que la función $g(z) = z/(-z^2 + k^2)$ es analítica en el plano superior complejo.

Lema de Jordan

Supongamos que:



1. una función $f(z)$ es analítica en todos los puntos z en la parte superior del plano $y \geq 0$ que están en el exterior de un círculo $|z| = R_0$;
2. \mathfrak{C}_R denota un semicírculo $z = R e^{i\theta}$ ($0 \leq \theta \leq \pi$), donde $R > R_0$;
3. para todos los puntos en \mathfrak{C}_R , existe una constante M_R tal que $|f(z)| \leq M_R$ donde $\lim_{R \rightarrow \infty} M_R = 0$

Entonces, para cualquier constante positiva a

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\mathfrak{C}_R} f(z) e^{iaz} dz = 0$$

Dadas las condiciones antes demostradas, de acuerdo al Lema de Jordan se tiene que:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\mathfrak{C}_R} \frac{z e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-z^2 + k^2} dz = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\mathfrak{C}_R} g(z) e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dz = 0 \quad (2.67)$$

Juntando los resultados en (2.65) y (2.66), así como asumiendo que $1 \ll R$ para poder considerar el resultado en (2.67), la integral (2.64) estará dada por:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{q e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-q^2 + k^2} &= \left\{ \int_{L_1} + \int_{L_2} \right\} \frac{z e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-z^2 + k^2} dz = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0, R \rightarrow \infty} \left[\int_{\mathfrak{C}_{\varepsilon, \pm}} + \int_{\mathfrak{C}_R} \right] \frac{z e^{iz|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{-z^2 + k^2} dz \\ &= \mp i\pi e^{\mp ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad (2.68)$$

Finalmente, sustituyendo el resultado (2.68) en la expresión de la función de Green $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dada en (2.59), se obtiene:

$$\begin{aligned} G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{-1}{i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{1}{4\pi^2} \left[\pm i\pi e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right] = \mp \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = G_k^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \text{con } G_k^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \mp \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad (2.69)$$

De acuerdo con la convención de (2.10) para la dependencia del tiempo, el término con (+) en (2.69) representa una onda esférica divergente que se propaga desde el origen, mientras que el segundo representa una onda esférica convergente. Es intuitivamente obvio que si una fuente está inactiva hasta algún tiempo $t = 0$ y luego comienza a funcionar, la función de Green apropiada es $G_k^{(+)}$ en (2.69), correspondiente a ondas irradiadas hacia afuera desde la fuente y cuya expresión cumple condición de absorción ($Im[k] > 0$). Esta descripción es ciertamente correcta y también conveniente, pero no es única ni necesaria. Mediante una especificación adecuada de la amplitud de la onda en los tiempos límite, es posible emplear la función en $G_k^{(-)}$ en (2.69), no el primero, para describir la acción de la fuente. Por otra parte, como se mencionó anteriormente, el procedimiento antes realizado para el caso tres dimensional se puede aplicar de manera similar para otras dimensiones, particularmente para $d = 1, 2$. Para esto, es necesario partir de la versión integral de la función de Green dada por (2.58) y trabajar, con la versión d -dimensional de interés, de manera análoga al procedimiento reportado en esta sección. Los resultados obtenidos para las diferentes dimensiones se reportan en la tabla 2.2, la cual fue extraída de la referencia [20].

d-Dimensión	Laplace ∇^2	Helmholtz $\nabla^2 + k^2$	Helmholtz modificada $\nabla - k^2$
1-dimensional	No solución para $(-\infty, \infty)$	$\frac{i}{2k} \exp(ik x - x')$	$\frac{1}{2\pi} \exp(-k x - x')$
2-dimensional	$-\frac{1}{2\pi} \ln(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$	$-\frac{i}{4} H_0^{(1)}(k \mathbf{r} - \mathbf{r}')$	$\frac{1}{2\pi} K_0(k \mathbf{r} - \mathbf{r}')$
3-dimensional	$\frac{1}{4\pi} \frac{1}{ \mathbf{r} - \mathbf{r}' }$	$-\frac{\exp(ik \mathbf{r} - \mathbf{r}')}{4\pi \mathbf{r} - \mathbf{r}' }$	$\frac{\exp(-k \mathbf{r} - \mathbf{r}')}{4\pi \mathbf{r} - \mathbf{r}' }$

Tabla 2.2: Funciones de Green, que satisfacen la condición de frontera $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$ con $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, de los operadores de Laplace, Helmholtz y Helmholtz modificada. El operador de Helmholtz corresponde a la onda esférica saliente. $H_0^{(1)}$ es la función de Hankel y K_0 es la función de Bessel modificada.

2.4. Función de Green en coordenadas esféricas

Para manejar problemas que involucren distribuciones de carga y corriente, así como valores límites para los potenciales, es necesario determinar la función de Green que satisfaga las condiciones de frontera adecuadas. A menudo, estas condiciones de contorno se especifican sobre una superficie de algún sistema de coordenadas curvilíneo, por ejemplos en una superficie esférica o cilíndrica. Entonces, es conveniente expresar la función de Green como una serie de productos de funciones adecuada a las coordenadas en cuestión. Como primer acercamiento se puede ilustrar el tipo de expansión involucrada para el caso de coordenadas esféricas, cuya convención se variables se ilustra en la figura 2.3.

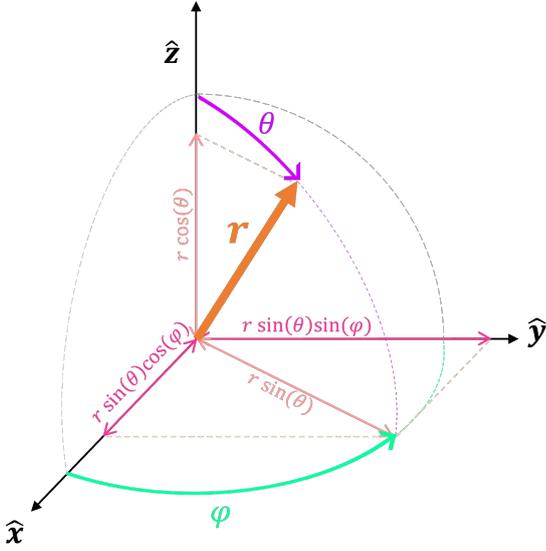


Figura 2.3: Convención para definición de las variables esféricas r , θ , φ , donde a θ se le conoce como ángulo poloidal y φ se le conoce como azimutal.

Con propósitos de referencia, se desarrollará la expansión de onda esféricas para la función de Green de onda saliente $G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ obtenida para el caso libre de superficies de frontera, excepto en infinito, y a la cual consideramos que ya ha sido aplicado el límite $Im[k] \rightarrow 0$. Entonces, partimos de que la función de Green satisface la ecuación de Helmholtz dada por:

$$(\nabla^2 + k^2) G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

y la cual se demostró correspondía a:

$$G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

En general, se puede realizar la expansión de $G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ explotando representación de la función $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ en coordenadas curvilíneas, como se especifica en (2.47). En el caso particular de las coordenadas esféricas, la función delta puede ser escrita como:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{r^2} \delta(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos \theta - \cos \theta'),$$

donde podemos usar la relación de completos de los armónicos esféricos para representar las funciones deltas de las variables angulares de la forma

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{r^2} \delta(r - r') \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (2.70)$$

Ahora bien, usando el mismo razonamiento para la expansión de la función de Green en términos de los armónicos esféricos, nos concentramos primero en la dependencia de la función con respecto a \mathbf{r} , de tal manera que se obtiene:

$$G_k^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_l^m(r|r', \theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (2.71)$$

Sustituyendo las representaciones de la delta (2.70) y la función de Green (2.71) en la ecuación de Hemholtz (2.45) se tiene que:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2) \left[\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_l^m(r|r', \theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi) \right] &= (\nabla^2 + k^2) G_k^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &= -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = - \left[\frac{1}{r^2} \delta(r - r') \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi) \right]. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Ahora bien, es posible escribir explícitamente el operador diferencial ∇^2 en coordenadas esféricas, dado por:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} L^2,$$

donde se ha definido al operador

$$L^2 \equiv -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

La motivación de reescribir el operador diferencial en términos del operador L^2 es debido a que los armónicos esféricos son eigenfunciones del mismo. Para demostrarlo se puede partir de la definición de los armónicos esféricos:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \equiv (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (2.73)$$

Por lo tanto, aplicando el operador L^2 a los armónicos esféricos, se obtiene explícitamente:

$$L^2 [Y_l^m(\theta, \varphi)] = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} \left[-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_l^m(\cos \theta) \quad (2.74)$$

Particularmente, cuando se aplica el método de separación de variables a la ecuación de Helmholtz en coordenadas esféricas, sabemos que una de las ecuaciones diferenciales ordinarias que se obtiene es la ecuación de Legendre asociada:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_l^m(\cos \theta)}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_l^m(\cos \theta) = 0 \quad (2.75)$$

para lo cuál, sabemos que las soluciones regulares $P_l^m(x)$ con $m \geq 0$ un entero, son:

$$P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad \text{y} \quad \text{con} \quad P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l,$$

donde $P_l(x)$ es el polinomio de Legendre, mientras que P_l^m es el polinomio asociado de Legendre. En consecuencia, despejando de la ecuación (2.75) y sustituyendo en la ecuación (2.74) se obtiene:

$$\begin{aligned} L^2 [Y_l^m(\theta, \varphi)] &= (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} [l(l+1) P_l^m(\cos \theta)] \\ &\Rightarrow L^2 [Y_l^m(\theta, \varphi)] = l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (2.76)$$

El resultado en la ecuación (2.76) demuestra que los armónicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$ son eigenfun-

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

ciones del operador L^2 . Usando este resultado en la ecuación (2.72) se tiene que

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \varphi) \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] A_l^m(r|r', \theta', \varphi') = -\frac{1}{r^2} \delta(r-r') \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Ahora bien, se puede explotar la propiedad de ortogonalidad de los armónico esféricos, dada por:

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_{n_1}^{m_1*}(\theta, \varphi) Y_{n_2}^{m_2}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{n_1 n_2} \delta_{m_1 m_2},$$

para simplificar la ecuación obtenida anteriormente. Así, si multiplicamos ambos lados de la igualdad por el término $Y_{l'}^{m'*}(\theta, \varphi)$ e integramos con respecto al ángulo sólido, se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ \underbrace{\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_{l'}^{m'*}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi}_{\delta_{l'l'} \delta_{mm'}} \right\} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] A_l^m(r|r', \theta', \varphi') \\ = -\frac{1}{r^2} \delta(r-r') \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ \underbrace{\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_{l'}^{m'*}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi}_{\delta_{l'l'} \delta_{mm'}} \right\} Y_l^m(\theta', \varphi') \end{aligned}$$

que simplemente se resume en:

$$\Rightarrow \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + (kr)^2 - l(l+1) \right] A_l^m(r|r', \theta', \varphi') = -\delta(r-r') Y_l^m(\theta', \varphi'). \quad (2.77)$$

Ahora bien, de manera análoga a como se expandió la función de Green $G_k^+(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, podemos expandir el término A_l^m en términos de los armónicos esféricos con respecto a las variables angulares primadas, de tal forma que:

$$A_l^m(r|r', \theta', \varphi') = \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} g_{l'}^{m'}(r, r') Y_{l'}^{m'*}(\theta', \varphi').$$

En consecuencia, sustituyendo la relación serie de A_l^m en la ecuación (2.77) se obtiene:

$$\sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} Y_{l'}^{m'*}(\theta', \varphi') \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + (kr)^2 - l(l+1) \right] g_{l'}^{m'}(r, r') = -\delta(r-r') Y_l^m(\theta', \varphi').$$

De manera análoga a como se realizó en los casos anteriores, podemos simplificar la expresión anterior usando la ortogonalidad de los armónico al multiplicar por el término $Y_p^{q*}(\theta', \varphi')$ e integrando con respecto al ángulo sólido, obteniendo así:

$$\begin{aligned} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \underbrace{\left(\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{l'}^{-m'}(\theta', \varphi') Y_p^{q*}(\theta', \varphi') \sin \theta d\theta d\varphi \right)}_{\delta_{l'p} \delta_{m'q}} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + (kr)^2 - l(l+1) \right] g_{l'}^{m'}(r, r') \\ = -\delta(r-r') \underbrace{\left(\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_l^m(\theta', \varphi') Y_p^{q*}(\theta', \varphi') \sin \theta d\theta d\varphi \right)}_{\delta_{lp} \delta_{mq}}, \end{aligned}$$

donde, por transitividad, se tiene que $l' = p = l$ y $-m' = q = m$ y, por lo cual, la serie de A_l^m se

reduce al término:

$$A_l^m(r|r', \theta', \varphi') = g_l(r, r') Y_l^{m*}(\theta', \varphi') \quad (2.78)$$

y, por otra parte, se obtiene que la ecuación que tiene que cumplir la función $g_l(r, r')$, también conocida como función de Green reducida, está dada por:

$$\left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + (kr)^2 - l(l+1) \right] g_l(r, r') = -\delta(r - r'). \quad (2.79)$$

Para resolver la ecuación (2.79) resulta conveniente expandir la función de Green reducida $g_l(r, r')$, en las funciones propias de la ecuación homogénea con respecto a la variable r , es decir, considerando la variable r' como un parámetro y, por lo tanto, resolviendo la ecuación diferencial ordinaria de segundo orden correspondiente al cambio de $\frac{\partial}{\partial r} \rightarrow \frac{d}{dr}$.

En este punto del análisis, para resolver el problema de manera consistente, se propone abordar la expansión en funciones propias de la ecuación homogénea desde una perspectiva general, es decir, desde la Teoría de funciones de Green. Así, con base en el formalismo expuesto, se procederá a abordar la ecuación (2.79) de manera particular, lo que nos llevará a la resolución de la ecuación de Bessel y al análisis de condiciones de frontera para determinar finalmente la función de green reducida $g_l(r, r')$ asociada a la solución de las ecuaciones de Maxwell.

2.4.0.1. Teoría de expansión en funciones propias.

En general, podemos suponer que la ecuación homogénea asociada es satisfecha por un conjunto de funciones orto-normales $\psi_l(x)$, tal que:

$$\mathcal{L}[\psi_l(x)] + \nu_l \psi_l(x) = 0 \quad \text{donde} \quad \mathcal{L} = \frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} \right) + q(x) \quad (2.80)$$

Por otra parte, sabemos que la función de green reducida $g(x, x')$ satisface la ecuación de fuente puntual, dada por

$$\mathcal{L}[g(x, x')] + \nu g(x, x') = -\delta(x - x')$$

junto con las condiciones de frontera impuestas en la solución de la ecuación homogénea, las cuales se discutirán con mayor detalle más adelante. Eventualmente, para acoplar la solución homogénea, la cual suele ser más sencillo de calcular, con la solución de la ecuación no homogénea, una propuesta ingeniosa es expandir la función de Green reducida $g(x, x')$ como una combinación lineal en términos de las funciones de la ecuación de homogénea, es decir:

$$g(x, x') = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(x') \psi_n(x). \quad (2.81)$$

En consecuencia, al sustituir la expansión propuesta en la ecuación no homogénea a resolver, se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} a_n(x') (-\nu_n + \nu) \psi_n(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n(x') (\mathcal{L} + \nu) [\psi_n(x)] = (\mathcal{L} + \nu) [g(x, x')] \\ &= -\delta(x - x') = -\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n(x'), \end{aligned}$$

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

donde $\delta(x - x')$ se ha remplazado por su expansión en términos de las funciones orto-normales ψ_n . Ahora bien, si usamos la propiedad de ortogonalidad de las funciones $\psi_n(x)$ para aislar al término $a_n(x')$ se tiene:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n(x')(\nu_n + \nu) \underbrace{\left[\int \psi_n(x)\psi_m(x)d^3r \right]}_{\delta_{nm}} = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\left[\int \psi_n(x)\psi_m(x)d^3x \right]}_{\delta_{xm}} \psi_n(x'),$$

o bien:

$$a_m(x')(\nu - \nu_m), = \psi_m(x')$$

Entonces, sustituyendo el valor de $a_m(x')$ en la ecuación (2.81), la función de Green reducida se convierte en:

$$\boxed{g_l(x, x') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n(x)\psi_n(x')}{\nu_n - \nu}} \quad (2.82)$$

Ahora bien, como se ha remarcado constantemente, para que la solución dada en (2.82) sea la solución a un problema real debe cumplir condiciones de frontera particulares. Para abordar un problema en general, definiremos que las condiciones estarán dadas en el intervalo $[a, b]$, de tal manera que las condiciones de frontera estarán definidas en $x = a$ y $x = b$. En consecuencia, es necesario recurrir a dos soluciones diferentes de la ecuación diferencial homogénea, por lo que es recomendable dividir el intervalo de análisis en dos parte con respecto a un parámetro η , de tal manera que supondremos:

- $u(x)$, $a \leq x < \eta$ con $\mathcal{L}[u(x)] = 0$ y u satisface condición de frontera en $x = a$.
- $v(x)$, $\eta < x \leq b$ con $\mathcal{L}[v(x)] = 0$ y v satisface condición de frontera en $x = b$.

Ahora bien, es congruente imponer que la solución general $g(x)$ sea continua, por lo que se tiene

$$\lim_{x \rightarrow \eta^-} u(x) = \lim_{x \rightarrow \eta^+} v(x).$$

También, dado que se proponen dos soluciones diferentes, se requiere que la función $g'(x)$ sea discontinua, especialmente se tiene:

$$\frac{d}{dx}v(x)|_{\eta} - \frac{d}{dx}u(x)|_{\eta} = -\frac{1}{p(\eta)},$$

donde $p(\eta)$ corresponde al término expresado en el operador auto-adjunto definido en (2.80). Además, se enfatiza que con la primera derivada discontinua, la segunda derivada no existe. Estos requisitos, en efecto, hacen de $g(x)$ una función de dos variables, es decir $g(x, \eta)$. Además, observamos que $g(x, \eta)$ depende tanto de la forma del operador diferencial \mathcal{L} como de las condiciones de contorno que debe satisfacer $y(x)$. Con base en lo anterior, se propone la siguiente solución:

$$g(x, \eta) = \begin{cases} c_1 u(x) & a \leq x < \eta, \\ c_2 v(x) & \eta < x \leq b. \end{cases}$$

Por otra parte, para analizar la existencia y unicidad de la solución, se define el Wronskiano $W(\eta)$ de la siguiente manera

$$W(\eta) = \begin{vmatrix} u(\eta) & v(\eta) \\ u'(\eta) & v'(\eta) \end{vmatrix} = u(\eta)v'(\eta) - v(\eta)u'(\eta) = \frac{A}{p(\eta)}, \quad (2.83)$$

donde se ha asumido que $u(x)$ y $v(x)$ son linealmente independientes y que A es una constante. Con base en la definición del Wronskiano, se sabe que existe una única solución de los coeficientes c_1 y c_2 si $W(\eta) \neq 0$. Consecuentemente, comparando el resultado del Wronskiano con la condición de discontinuidad de la primera derivada, se identifica que:

$$c_1 = -\frac{v(\eta)}{A}, \quad c_2 = -\frac{u(\eta)}{A},$$

solución que también satisface la condición de continuidad de las funciones en el valor η . De esta manera, sustituyendo la expresión de la constantes en la definición inicial propuesta para la función de green se obtiene:

$$g(x, \eta) = \begin{cases} -\frac{1}{A} u(x) v(\eta) & a \leq x < \eta, \\ -\frac{1}{A} u(\eta) v(x) & \eta < x \leq b. \end{cases} \Rightarrow \boxed{g(x_<, x_>) = -\frac{1}{A} u(x_<) v(x_>)} \quad (2.84)$$

Por lo tanto, para implementar la condiciones de frontera, se propone el uso de dos funciones propias de tal manera que cada una de ellas, por separado, aseguraran el valor esperado de la función de Green en los límites del rango de aplicación, llegando así a la expresión en (2.84).

2.4.0.2. Funciones de Bessel

Para la implementación de la expansión mencionada en la subsección anterior, es necesario conocer las funciones propias del problema homogéneo

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = 0 \quad (2.85)$$

que, aunque tiene la virtud de ser auto-adjunta cuando $k \in \mathbb{R}$ y de parecerse a la famosa ecuación de Bessel, no es dicha ecuación claramente. Para cambiar la expresión a nuestro favor, se propone reescribir la función $R_l(r)$ de la forma:

$$R_l(kr) = \frac{Z_l(kr)}{(kr)^{1/2}}, \quad (2.86)$$

donde es claro que su comportamiento en valores límites ($kr \ll 1$ y $kr \rightarrow \infty$) dependerá fuertemente del comportamiento límite y asintótico de la función $Z_l(x)$. Por otra parte, para sustituir de manera correcta en la ecuación (2.85) basta comprobar que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} [R_l(r)] &= \left(\frac{k}{r}\right)^{1/2} \frac{d}{d(kr)} [Z_l(kr)] - \frac{1}{2(kr^3)^{1/2}} Z_l(kr) \\ \frac{d^2}{d(kr)^2} [R_l(r)] &= \left(\frac{k^3}{r}\right)^{1/2} \frac{d^2}{d(kr)^2} [Z_l(kr)] - \left(\frac{k}{r^3}\right)^{1/2} \frac{d}{d(kr)} [Z_l(kr)] + \frac{3}{4(kr^5)^{1/2}} Z_l(kr). \end{aligned}$$

Así, al sustituir (2.86), junto con los resultados obtenidos de la derivación directa con respecto a r , la ecuación homogénea (2.85) se convierte en:

$$(kr)^2 \frac{d^2}{d(kr)^2} [Z_l(kr)] + (kr) \frac{d}{d(kr)} [Z_l(kr)] + \left((kr)^2 - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right) Z_l(kr) = 0. \quad (2.87)$$

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

Al hacer el cambio de variable $x = kr$ e intercambiar $Z_l \rightarrow y$ la ecuación se resume a:

$$x^2 y''(x) + x y'(x) + (x^2 - \nu^2) y(x) = 0, \quad (2.88)$$

la cual corresponde a la ecuación de Bessel. Para obtener una expresión analítica de la solución a esta ecuación diferencial, comúnmente se usa el método de Frobenius. En este se propone una expansión en serie de potencias de la forma $y(x) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} x^{\gamma+\lambda}$ y se explota la propiedad de independencia lineal de los polinomios para analizar los coeficientes y los posibles valores del exponente γ . Por ejemplo, del análisis de la potencia $\lambda = 0 \rightarrow x^{\gamma}$ se obtiene:

$$a_0[\gamma(\gamma + 1) + \gamma - \nu^2] = 0 \quad \rightarrow \quad \gamma = \pm\nu \quad \text{si } a_0 \neq 0$$

es decir, de esta manera se restringe el valor del exponente γ en función del valor constante “ ν ” que aparece explícitamente en la ecuación de Bessel. Mas aún, considerando explícitamente el caso $\gamma = +\nu$ para obtener la solución de Bessel de primer tipo, para los coeficientes a_j se obtiene la relación de recurrencia dada por:

$$a_{2p} = (-1)^p \frac{a_0 \nu!}{2^{2p} p! (\nu + p)!}.$$

De esta manera, la solución de la ecuación de Bessel de orden ν , la cual se denota por $J_{\nu}(x)$, está dada por:

$$J_{\nu}(x) = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{1}{j! (\nu + j)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu+2j}, \quad (2.89)$$

donde se omitieron los términos $a_0 2^n \nu!$ ya que, para asegurar la condición de orto-normalidad de las funciones de Bessel (de primer tipo), su valor debe ser igual a 1. También se enfatiza que, debido a que la función de primer tipo corresponde a una serie de potencias positivas ($\nu > 0$), esta solución es finita en el origen.

Por otra parte, dado que la ecuación de Bessel (2.88) corresponde a una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, para su solución es necesario contar con dos soluciones linealmente independiente. Ahora bien, dado que las funciones de Bessel de primer tipo (2.89) se obtuvieron con base en la elección de $\gamma = \nu$, en primera instancia uno estaría tentado a elegir como segunda solución la función obtenida de la elección $\gamma = -\nu$, es decir, considerar $J_{-\nu}$. Más aún, al repetir el método de Frobenius con $\gamma = -\nu$, se observa que $J_{-\nu}$ genera una segunda serie diferente a J_{ν} para el caso en que $\nu \notin \mathbb{Z}$. Sin embargo, para el caso en que $\nu \in \mathbb{Z}$, el término $j = 2\nu$ anula la relación de recurrencia, por lo cual, para este caso se propone

$$J_{-\nu}(x) = (-1)^{\nu} J_{\nu}(x), \quad \nu \in \mathbb{Z}. \quad (2.90)$$

De esta manera, en general, para obtener una segunda solución linealmente independiente, se propone

$$N_{\nu} = \frac{\cos(\nu\pi) J_{\nu}(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)}. \quad (2.91)$$

relación que reproduce la solución propuesta para $\nu \in \mathbb{Z}$. La función $N_{\nu}(x)$ es conocida como la función de Neumann. De este modo, la solución más general para cualquier ν , se puede escribir

como:

$$y(x) = A J_\nu(x) + B N_\nu(x). \quad (2.92)$$

Una observación importante de realizar a estas alturas del estudio corresponde al análisis de los valores de las funciones de Bessel para valores límites. Por ejemplo, para la función de Neumann N_ν , de la expansión (2.89) y tomando el caso límite $x \rightarrow 0$, particularmente se obtiene [20]:

$$N_\nu(x) = -\frac{1}{\pi}(\nu-1)! \left(\frac{2}{x}\right)^\nu + \dots + \frac{2}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \ln\left(\frac{x}{2}\right) + \dots. \quad (2.93)$$

Esta última expresión exhibe la dependencia logarítmica de la función de Neumann. De esta manera, el resultado (2.93) demuestra que para cualquier condición de frontera que requiera que la solución sea finita en el origen es necesario excluir automáticamente a $N_\nu(x)$, dejándonos otra vez con la situación de una única solución.

Por otra parte, buscando un comportamiento de onda esférica saliente en infinito, es conveniente introducir las funciones de Hankel $H_\nu^{(1)}(x)$ y $H_\nu^{(2)}(x)$ definidas por:

$$H_\nu^{(1,2)}(x) = J_\nu(x) \pm i N_\nu(x), \quad (2.94)$$

las cuales poseen un comportamiento asintótico que las hacen útiles. La expansión en serie de las funciones de Hankel puede obtenerse combinando las expansiones (2.89) y (2.93), de tal manera que, escribiendo el primer término explícitamente, se tiene:

$$H_\nu^{(1,2)}(x) \approx \mp i \frac{(\nu-1)!}{\pi} \left(\frac{2}{x}\right)^\nu + \dots \quad \nu > 0. \quad (2.95)$$

Más aún, dado que las funciones de Hankel son combinaciones lineales, con coeficientes constantes, de J_ν y N_ν , satisfacen la ecuación de Bessel y poseen las mismas relación de recurrencia.

En general y con el propósito de concluir el análisis requerido de la función de Bessel, la función de Bessel J_ν , la función de Neumann N_ν y las funciones de Hankel $H_\nu^{(1,2)}$ forman un zoológico de funciones que resuelven la ecuación (homogénea) de Bessel dada en (2.92), donde cada una de ellas posee características especiales que deberán ser explotadas en pro de la resolución de ejercicios particulares. En general, a dicho zoológico de funciones se les puede representar por medio de la función $Z_l(kr)$, de acuerdo con la notación de la ecuación (2.86). Más aún, dado que la definición de $Z_l(kr)$ le permite ser solución de la ecuación de Bessel, se bautiza a la ecuación (2.85) con el nombre de función de Bessel esférica. Esta última ecuación es común en la resolución de problemas físicos, por lo que es conveniente etiquetar sus soluciones, conocidas con el nombre de funciones de Bessel esféricas, como se reportan en la Tabla 2.3.

$j_\nu(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\nu+1/2}(x) = 2^\nu x^\nu \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s+\nu)!}{s!(2s+2\nu+1)!} x^{2s}$
$n_\nu(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{\nu+1/2}(x) = (-1)^{\nu+1} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{-\nu-1/2}(x) = (-1)^{\nu+1} \frac{2^\nu \pi^{1/2}}{x^{\nu+1}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s-\nu)!}{s!(2s-2\nu+1)!} x^{2s}$
$h_\nu^{(1),(2)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{\nu+1/2}^{(1,2)} = j_\nu(x) \pm i n_\nu(x) \quad \text{con} \quad h_\nu^{(1)}(z) = (-1)^{\nu+1} \frac{e^{iz}}{z} \sum_{s=0}^n \frac{i^s}{s!(2z)^s} \frac{(n+s)!}{(n-s)!}$

Tabla 2.3: Funciones de Bessel esféricas

Se precisa que las funciones de Bessel esféricas son expresadas en términos de una serie usando

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

la ecuación (2.89) y reemplazando ν por $\nu + \frac{1}{2}$. Además, se resalta que en la serie $h_\nu^{(1)}(z)$ para z real $j_\nu(z)$ corresponde a la parte real de la expresión y $n_\nu(z)$ es la parte imaginaria y que $h_\nu^{(2)}(z)$ corresponde al complejo conjugado.

Las expresiones en forma de serie son útiles para tres propósitos en particular:

- Calcular valores límites de las funciones ($x \rightarrow 0$, $x \rightarrow \infty$)
- representaciones analíticas para el caso $\nu = 0$, y como extensión de este
- una demostración de que las funciones de Bessel esféricas están cercanamente relacionadas con las funciones $\sin(x)$ y $\cos(x)$.

De manera particular, para los ordenes $\nu = 1, 2, 3$ se obtienen las expresiones reportadas en la tabla 2.4, mientras que los valores límite ($x \ll 1$) y el comportamiento asintótico de las funciones se reportan en la tabla 2.5.

$j_0(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{(2s+1)!} x^{2s} = \frac{\sin x}{x}$	$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$	$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3}{x^2} \cos x$
$n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}$	$n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$	$n_2(x) = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \cos x - \frac{3}{x^2} \sin x$
$h_0^{(1,2)}(x) = \mp \frac{i}{x} e^{\pm ix}$	$h_1^{(1)}(x) = e^{ix} \left(-\frac{1}{x} - \frac{i}{x^2}\right)$	$h_2^{(1)}(x) = e^{ix} \left(\frac{i}{x} - \frac{3}{x^2} - \frac{3i}{x^3}\right)$

Tabla 2.4: Expresiones de la funciones de Bessel esféricas para los primeros ordenes

$x \ll 1$	$x \rightarrow \infty$
$j_\nu(x) \approx \frac{2^\nu \nu!}{(2\nu+1)!} x^\nu = \frac{x^\nu}{(2\nu+1)!!}$	$j_\nu(x) \sim \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\nu\pi}{2}\right)$
$n_\nu(x) \approx \frac{(-1)^{\nu+1}}{2^\nu} \frac{(-\nu!)}{(-2\nu)!} x^{-\nu-1} = -(2\nu-1)!! x^{\nu-1}$	$n_\nu(x) \sim -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{\nu\pi}{2}\right)$
$h_\nu^{(1,2)}(x) \approx \pm i n_\nu(x)$	$h_\nu^{(1,2)}(x) \sim (\mp i)^{\nu+1} \frac{e^{\pm ix}}{x} = \mp i \frac{e^{\pm i(x - n\pi/2)}}{x}$

Tabla 2.5: Funciones de Bessel esféricas para valores límites ($x \ll 1$) y asintóticos ($x \rightarrow \infty$)

Los detalles importantes a resaltar de las expresiones en la tabla 2.5 son:

- Las expresiones en valores límites sugieren expresar las funciones esféricas de Bessel como combinación de seno y coseno
- A partir de los valores asintóticos vemos que:
 - $j_\nu(x)$ y $n_\nu(x)$ son apropiados para una descripción de ondas esféricas estacionarias
 - $h_\nu^{(1)}(x)$ y $h_\nu^{(2)}(x)$ corresponden a ondas viajeras. De esta manera, si se considera que la dependencia del tiempo para las ondas viajeras $e^{-i\omega t}$, entonces:
 - $h_\nu^{(1)}(x)$ produce una onda viajera saliente
 - $h_\nu^{(2)}(x)$ es una onda viajera entrante.

En resumen, aunque todas las funciones de Bessel presentadas en esta sección son soluciones de la ecuación diferencial en (2.92), es fundamental analizar, con base en el comportamiento de valores límites y asintóticos, que su comportamiento sea adecuado para las condiciones del problema o modelo en el que se pretendan ser usadas.

2.4.1. Función de green Reducida

Para el caso particular de la función de Green reducida $g_l(r, r')$ que resuelve la ecuación (2.79), se propuso una expansión en términos de las funciones propias de la ecuación diferencial homogénea (2.85) por lo que, de acuerdo con la expansión en (2.82), la función $g_l(r, r')$ se puede escribir de la forma:

$$g_l(r, r') = \sum_{\nu}^{\infty} \frac{Z_{\nu}(kr) Z_{\nu}(kr')}{\nu + l(l+1)}, \quad (2.96)$$

donde $z_{\nu}(kr)$ corresponde alguna de las funciones se enunciadas en la tabla 2.3. Más aún, dado que la función de Green reducida se deriva de la ecuación de Helmholtz (2.45) para resolver las ecuaciones de Maxwell, sabemos que $g_l(r, r')$ debe ser una función finita en el origen de coordenadas y debe tener un decaimiento de al menos $1/r$ en el infinito, siendo el caso límite cuando no se considera absorción. Estas condiciones de frontera se garantizan usando las funciones de Bessel esféricas con comportamiento en valores límites adecuados. En la literatura, **las soluciones que utilizan los primeros órdenes de las funciones de Bessel para la dependencia radial se denominan expansiones normales**, mientras que **las soluciones que utilizan órdenes superiores ($l > 1$) se denominan multipolos**. En particular, los multipolos de las funciones de Hankel del primer tipo ($h_l^{(1)}$) (multipolos radiativos) tienen características particularmente favorables, ya que representan ondas salientes, además de cumplir la condición de radiación de Sommerfeld (2.53) en el infinito. Sin embargo, debido a que son singulares en su origen, deben ubicarse fuera del dominio en el que se expande el campo. Por otro lado, las expansiones normales permanecen finitas en el origen, pero no cumplen la condición de radiación, por lo que solo pueden ser usadas en dominios finitos.

En síntesis, con base en lo anterior y en las ecuaciones (2.79), (2.84) y (2.86), la solución de Green reducida $g_l(r, r')$ que cumple las condiciones de dominio infinito y que tiene un comportamiento finito en el origen corresponde a:

$$g_l(r, r') = A j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>}),$$

donde el coeficiente A corresponde a la constante en la relación (2.84), la cual se formuló con base en la formula del Wronskiano (2.83) y el resultado $W' = -p(x)W$, para modelar la discontinuidad requerida en la primera derivada. Explícitamente, para determinar A se tiene

$$j_{\nu}(kr) h_{\nu}^{(1)'}(kr) - j_{\nu}'(kr) h_{\nu}^{(1)}(kr) = \frac{A}{p(kr)}.$$

Para resolver lo anterior se puede explotar la relación entre las funciones de Bessel y su versión en esféricas, la cual está dada por medio de un factor $(kr)^{-1/2}$ y un cambio de variable de la forma $x = kr$. De esta manera, se usa el resultado $J_{\nu}(x) H_{\nu}^{(1)'}(x) - J_{\nu}'(x) H_{\nu}^{(1)}(x) = \frac{2i}{\pi x}$ para determinar que $A = ik$ y, por lo tanto, se obtiene:

$$\boxed{g_l(r, r') = ik j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>})} \quad (2.97)$$

La función de Green reducida enunciada en (2.97) corresponde a la solución en espacio libre. Esta es usada en la expansión multipolar de los campos eléctrico $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$ y magnético $\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega)$, permitiendo un formalismo generalizado para la resolución de problemas en la teoría del Electromagnetismo.

2.5. Función de Green Diádica

Para introducir el concepto de funciones de Green diádicas en la teoría electromagnética de manera coherente, nos gustaría elevar primero las ecuaciones de Maxwell a una forma diádica. Consideramos tres conjuntos de campos que oscilan armónicamente con la misma frecuencia y en el mismo entorno que son producidos por tres distribuciones de corriente distintas $\tilde{\mathbf{J}}_j^{ext}$ con $j = (1, 2, 3)$. En un medio lineal, isotrópico y homogéneo, de acuerdo al conjunto de ecuaciones (2.21) - (2.24), se tiene que las ecuaciones de Maxwell para estos campos se pueden escribir en la forma:

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{E}_j(\vec{r}, \omega) &= i\omega \mu(\omega) \vec{H}_j(\vec{r}, \omega) \\ \nabla \times \vec{H}_j(\vec{r}, \omega) &= \vec{J}_j^{ext}(\vec{r}, \omega) - i\omega \epsilon(\omega) \vec{E}_j(\vec{r}, \omega) \\ \nabla \cdot \vec{J}_j^{ext}(\vec{r}, \omega) &= i\omega \rho_j^{ext}(\omega) \\ \nabla \cdot [\epsilon(\omega) \vec{E}_j(\vec{r}, \omega)] &= \rho_j^{ext}(\vec{r}, \omega) \\ \nabla \cdot [\mu(\omega) \vec{H}_j(\vec{r}, \omega)] &= 0,\end{aligned}$$

donde omitimos el símbolo \sim que usábamos para denotar que las funciones se encontraban descritas en el espacio de frecuencias ω , y donde también se ha cambiado la notación de letras remarcadas para denotar un vector por la notación $\vec{}$. Ahora bien, para reescribir la expresiones adoptaremos la notación (x_1, x_2, x_3) para el sistema de coordenadas cartesiano. Así, si juxtaponemos un vector unitario \hat{x}_j en la posición posterior de las ecuaciones anteriores y sumamos los tres conjuntos de ecuaciones con respecto a j , obtenemos las ecuaciones de Maxwell en forma diádica; a saber,

$$\boxed{\nabla \times \overleftrightarrow{E}(\vec{r}, \omega) = i\omega \mu(\omega) \overleftrightarrow{H}(\vec{r}, \omega)} \quad (2.98)$$

$$\boxed{\nabla \times \overleftrightarrow{H}(\vec{r}, \omega) = \overleftrightarrow{J}_{ext}(\vec{r}, \omega) - i\omega \epsilon(\omega) \overleftrightarrow{E}(\vec{r}, \omega)} \quad (2.99)$$

$$\boxed{\nabla \cdot \overleftrightarrow{J}_{ext}(\vec{r}, \omega) = i\omega \vec{\rho}_{ext}(\omega)} \quad (2.100)$$

$$\boxed{\nabla \cdot [\epsilon(\omega) \overleftrightarrow{E}(\vec{r}, \omega)] = \vec{\rho}_{ext}(\vec{r}, \omega)} \quad (2.101)$$

$$\boxed{\nabla \cdot [\mu(\omega) \overleftrightarrow{H}(\vec{r}, \omega)] = 0}, \quad (2.102)$$

donde

$$\overleftrightarrow{E} = \sum_j \vec{E}_j \hat{x}_j = \sum_i \sum_j E_{ij} \hat{x}_i \hat{x}_j \quad (2.103)$$

$$\overleftrightarrow{H} = \sum_j \vec{H}_j \hat{x}_j = \sum_i \sum_j H_{ij} \hat{x}_i \hat{x}_j \quad (2.104)$$

$$\overleftrightarrow{J}_{ext} = \sum_j \vec{J}_j^{ext} \hat{x}_j = \sum_i \sum_j J_{ij}^{ext} \hat{x}_i \hat{x}_j \quad (2.105)$$

$$\vec{\rho}_{ext} = \sum_j \rho_j^{ext} \hat{x}_j \quad (2.106)$$

De acuerdo con la nomenclatura del análisis diádico (B), una función diádica como \overleftrightarrow{E} tiene tres componentes vectoriales, \vec{E}_j con $j = (1, 2, 3)$, y la función de densidad de carga vectorial $\vec{\rho}_{ext}$ contiene tres distribuciones de carga escalares distintas. Es importante aclarar que $\vec{\rho}_{ext}$ no tiene el significado físico común de una cantidad vectorial y, en consecuencia, la magnitud de $\vec{\rho}_{ext}$ no tiene ningún significado físico en particular.

2.5.1. Campo de radiación de dipolos puntuales

Consideremos ahora las tres distribuciones de corriente que corresponden a tres **dipolos eléctricos puntuales infinitesimales** ubicados en \vec{r}' y orientados en la dirección $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$, respectivamente; entonces:

$$\boxed{\vec{J}_j^{ext} = c_j \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{x}_j, \quad j = (1, 2, 3)} \quad (2.107)$$

donde c_j denota un momento dipolar de corriente, que es:

$$\iiint \vec{J}_j^{ext} dv = c_j \hat{x}_j \quad (2.108)$$

Ahora, para simplificar aún más la notación, normalizaremos el momento de corriente para cada ω , de tal manera que:

$$\boxed{i\omega \mu(\omega) c_j = 1}; \quad (2.109)$$

entonces

$$i\omega \mu(\omega) \vec{J}_j^{ext} = i\omega \mu(\omega) c_j \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{x}_j \quad \Rightarrow \quad i\omega \mu(\omega) \vec{J}_j^{ext} = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{x}_j \quad (2.110)$$

Bajo estas condiciones, se introduce un nuevo conjunto de notaciones para las diversas funciones diádicas, dadas por:

$$\overleftrightarrow{E} = \overleftrightarrow{G}_e \quad (2.111)$$

$$i\omega \mu \overleftrightarrow{H} = \overleftrightarrow{G}_m \quad (2.112)$$

$$i\omega \mu \overleftrightarrow{J}_{ext} = \overleftrightarrow{I} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.113)$$

$$\vec{\rho}_{ext} = \frac{1}{i\omega} \nabla \cdot \overleftrightarrow{J}_{ext} = \frac{-1}{\omega^2 \mu} \nabla \cdot \left[\overleftrightarrow{I} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \right] = \frac{-\epsilon}{k^2} \nabla \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.114)$$

donde

$$k = \omega (\mu\epsilon)^{1/2} = \frac{\omega}{v} \quad v = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}} = \text{velocidad de la luz en el espacio libre.} \quad (2.115)$$

En las expresiones anteriores, ϵ y μ caracterizan las propiedades ópticas en las que están embebidos las distribuciones de carga y corriente externas y la expresión de $\vec{\rho}_{ext}$ en términos del gradiente de una función delta es consecuencia del gradiente en la tabla (B.3).

Por otra parte, con el cambio de notación propuesto en (2.111) - (2.114), las ecuaciones de Maxwell

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

en (2.98)-(2.102) para el caso de tres dipolos eléctricos puntuales se escriben de la forma:

$$\nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e = \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_m \quad (2.116)$$

$$\nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_m = \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \delta(\vec{r} - \vec{r}') + k^2 \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e \quad (2.117)$$

$$\nabla \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e = -\frac{1}{k^2} \nabla \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.118)$$

$$\nabla \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_m = 0, \quad (2.119)$$

donde hemos omitido explícitamente la relación entre $\overleftrightarrow{\mathbf{J}}_{ext}$ y $\vec{\rho}_{ext}$, pero mantenemos en mente que dicha relación está dada por la expresión en (2.100). La función de $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e$ así definida se denomina **función de Green diádica de tipo eléctrico o función de Green diádica eléctrica**, y la función $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_m$ se denomina **función de Green diádica de tipo magnético o función de Green diádica magnética**. Si escribimos estas dos funciones en la forma:

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e = \sum_j \vec{G}_{ej} \hat{x}_j \quad (2.120)$$

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_m = \sum_j \vec{G}_{mj} \hat{x}_j \quad (2.121)$$

entonces \vec{G}_{ej} y \vec{G}_{mj} denotan, respectivamente, la función vectorial Green del tipo eléctrico y la función vectorial Green del tipo magnético. Físicamente, \vec{G}_{ej} representa el campo eléctrico debido a un dipolo eléctrico infinitesimal orientado en la dirección de \hat{x}_j , ubicado en \vec{r}' , es decir:

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e = \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e(\vec{r}, \vec{r}') \quad (2.122)$$

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}_m = \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_m(\vec{r}, \vec{r}'), \quad (2.123)$$

donde \vec{r} denota la posición donde se evalúa el campo vectorial, y \vec{r}' representa la posición de la fuente puntual. Intuitivamente, si uno conoce los campos electromagnéticos de tres dipolos eléctricos infinitesimales ortogonales, es concebible que el campo debido a cualquier distribución de corriente se pueda encontrar por cuadratura, es decir, por medio de una integración con respecto a la posición de las fuentes. La técnica de la función de Green diádica se basa en esta premisa y, de esta manera, el significado físico de las tres funciones vectoriales de Green \vec{G}_{ej} se pueden esquematizar como se ilustra en la figura 2.4.

Por otra parte, en adición a las ecuaciones de Maxwell, se pueden ocupar las condiciones de frontera impuestas en la repre-

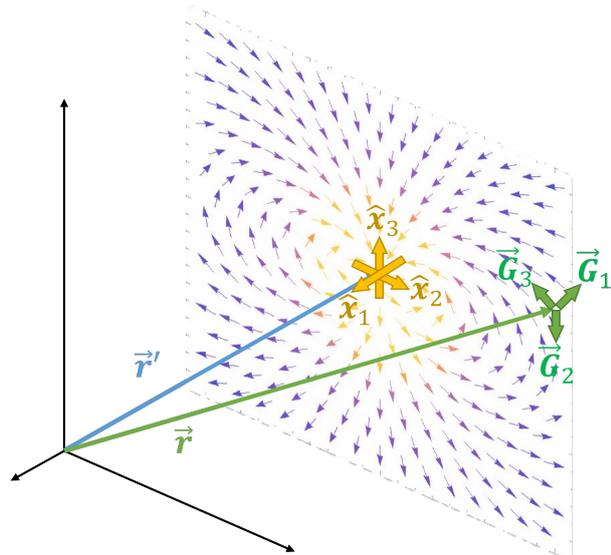


Figura 2.4: Campo eléctrico producido por tres dipolos eléctricos localizados en \vec{r}' en las direcciones x, y y z .

sentación vectorial para el análisis de las condiciones de contorno en la interfase entre donde regiones también se pueden deducir para el análisis diádico. Para esto, se analiza los campos en una interfase entre dos medios, como se ilustra en la Figura 2.5. Con base en las superficies y volumen definidos, se usan los teoremas de Stokes y Gauss para transformar las ecuaciones de Maxwell de su forma diferencial a su forma integral. Así, de estas últimas expresiones, se obtiene las condiciones de fronteras reportadas en la Tabla 2.6.

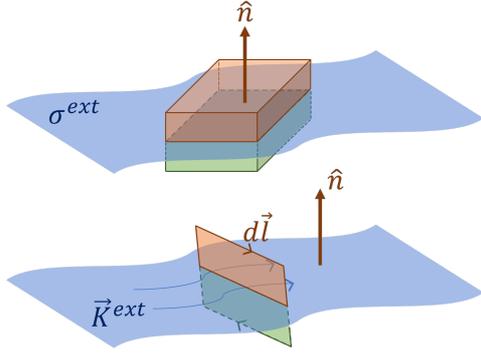


Figura 2.5: Esquema de dos regiones adyacente. \hat{n} denota el vector unitario que apunta desde una interfase al lado positivo de esa superficie

Ec.	Condición de frontera
(2.21)	$\hat{n} \times (\vec{E}_+ - \vec{E}_-) = \vec{0}$ (2.124)
(2.22)	$\hat{n} \times (\vec{H}_+ - \vec{H}_-) = \vec{K}_{ext}$ (2.125)
(2.24)	$\hat{n} \cdot (\vec{D}_+ - \vec{D}_-) = \sigma_{ext}$ (2.126)
(2.23)	$\hat{n} \cdot (\vec{B}_+ - \vec{B}_-) = 0$ (2.127)

Tabla 2.6: Condiciones de frontera de la representación vectorial de los campos Magnéticos, donde \vec{K}_{ext} y σ_{ext} denota la densidad de corriente y carga superficial, respectivamente

Por consiguiente, al considerar tres conjuntos de campos eléctricos debidos a tres dipolos eléctricos infinitesimales y ortogonales entre sí, podemos elevar la condición de frontera (2.124) a una forma diádica, obteniéndose como resultado:

$$\hat{n} \times (\overleftrightarrow{G}_e^+ - \overleftrightarrow{G}_e^-) = 0 \quad (2.128)$$

Por otra parte, sin pérdida de generalidad, podemos modelar a la densidad de corriente superficial \vec{K}_{ext} en (2.125) en términos de dos dipolos eléctricos infinitesimales y tangenciales a la interfase entre los medios, de esta manera se aborda a cualquier distribución superficial. A su vez, con base en lo anterior, se puede definir a la densidad de corriente superficial diádica $\overleftrightarrow{K}_{ext}$ de la forma:

$$i\omega\mu \overleftrightarrow{K}_{ext} = \overleftrightarrow{I}_s^{ext} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.129)$$

donde $\overleftrightarrow{I}_s^{ext}$ denota la identidad diádica en dos dimensiones, definida por:

$$\overleftrightarrow{I}_s^{ext} = \overleftrightarrow{I} - \hat{n} \otimes \hat{n}, \quad (2.130)$$

donde $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ denota la función bidimensional de dirac tal que $\iint_{B^2(\vec{r}')} \delta(\vec{r} - \vec{r}') d\Omega(\vec{r}) = 1$, donde la notación de $B^2(\vec{r}')$ hace referencia a que la integración incluye a los puntos \vec{r}' en la superficie, como se describe en el apéndice B en la ec. (B.2). Con base en lo anterior, la condición de frontera

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

(2.125) se puede elevar de la forma vectorial a una forma diádica, dando como resultado:

$$\hat{n} \times \left(\overleftrightarrow{G}_m^+ - \overleftrightarrow{G}_m^- \right) = \overleftrightarrow{I}_s^{ext} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.131)$$

donde $\overleftrightarrow{G}_m^+$ y $\overleftrightarrow{G}_m^-$ representan, respectivamente, $i\omega\mu\overleftrightarrow{H}^+$ y $i\omega\mu\overleftrightarrow{H}^-$. Las dos condiciones de frontera establecidas en (2.128) y (2.131) son dos relaciones claves que se usan frecuentemente para la resolución de problemas con interfases, como se demostrará en las siguientes secciones.

2.5.2. Función de Green diádica dipolar en espacio libre

Las funciones de Green diádica eléctrica $\overleftrightarrow{G}_e = \overleftrightarrow{E}$ y magnética $\overleftrightarrow{G}_m = i\omega\mu\overleftrightarrow{H}$ construidas bajo la consideración de dipolos eléctricos puntuales como fuentes de los campos, deben satisfacer las ecuaciones de Maxwell en su forma diádica. En particular, si calculamos el rotacional de la ecuación (2.98) y sustituimos la ecuación (2.99) en el resultado, se obtiene:

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e &= \nabla \times \left\{ \nabla \times \overleftrightarrow{E} \right\} = \nabla \times \left[i\omega\mu\overleftrightarrow{H} \right] = i\omega\mu\overleftrightarrow{J} + \omega^2\epsilon\mu\overleftrightarrow{E} \\ &\Rightarrow \boxed{\nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e - k^2\overleftrightarrow{G}_e = \overleftrightarrow{I}\delta(\vec{r} - \vec{r}')}, \end{aligned} \quad (2.132)$$

donde se usó el resultado (2.113). De manera análoga, calculando el rotacional de la ecuación (2.99) y sustituimos la ecuación (2.98) en el resultado, se obtiene:

$$\begin{aligned} (i\omega\mu)^{-1}\nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{G}_m &= \nabla \times \left\{ \nabla \times \overleftrightarrow{H} \right\} = \nabla \times \left\{ \overleftrightarrow{J} - i\omega\epsilon\overleftrightarrow{E} \right\} \\ &= \nabla \times \overleftrightarrow{J} - i\omega\epsilon\nabla \times \overleftrightarrow{E} = \nabla \times \left[\overleftrightarrow{I}\delta(\vec{r} - \vec{r}') \right] + \omega^2\epsilon\mu\overleftrightarrow{H} \\ &\Rightarrow \boxed{\nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{G}_m - k^2\overleftrightarrow{G}_m = \nabla \times \left[\overleftrightarrow{I}\delta(\vec{r} - \vec{r}') \right]}, \end{aligned} \quad (2.133)$$

Una observación muy útil en este punto del análisis se logra al comparar las expresiones (2.132) y (2.133) con las ecuaciones de onda vectorial en (2.29) y (2.30), respectivamente, ya que se observa una misma estructura entre las ecuaciones. Derivado de esta observación, uno de los métodos que se proponen para la solución de las ecuaciones de Maxwell diádica (2.132) y (2.133) corresponde al método de potenciales, el cual se abordó para la resolución del análogo vectorial ya mencionado. Adicionalmente, también es posible observar que distribución de corriente $i\omega\mu\vec{J}_j(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\hat{x}_j$, la cual corresponde a un dipolo eléctrico infinitesimal orientado en \hat{x}_j y fue propuesta para la construcción de las funciones de Green diádicas, coincide con la fuente propuesta en (2.49) para la definición de la función de Green de la ecuación de Helmholtz escalar (2.45). De esta manera, hilando las observaciones anteriores, es posible dilucidar que:

$$(\nabla^2 + k^2)\vec{A}(\vec{r}) = -\mu\vec{J}(\vec{r}) \sim \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad \Rightarrow \quad \boxed{\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{i\omega} G_k(\vec{r}, \vec{r}')\hat{x}_j}, \quad (2.134)$$

donde $G_k(\vec{r}, \vec{r}')$ está dado por (2.69), es decir, que está dado por:

$$G_k(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad \text{con} \quad k^2 = \omega^2\tilde{\epsilon}(\omega)\tilde{\mu}(\omega) \quad \text{del espacio libre.}$$

Por otra parte, con base en (2.43), se tiene que:

$$\boxed{\vec{E}_{k,j}(\vec{r}) = \vec{G}_{e;k,j}(\vec{r}, \vec{r}') = \left(1 + \frac{1}{k^2} \nabla(\nabla \cdot)\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}') \hat{x}_j}, \quad (2.135)$$

donde $\vec{G}_{e;k,j}$ denota la función de Green eléctrica, en el espacio libre, debido a una fuente puntual que apunta en la dirección \hat{x}_j , para $j = 1, 2, 3$. Consecuente a esto, la función de Green diádica eléctrica en el espacio libre $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$ puede ser construida yuxtaponiendo un vector unitario \hat{x}_i , del lado derecho de la expresión (2.135), y sumando la expresión con respecto a j , de donde se obtiene:

$$\overleftrightarrow{G}_{e;k}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_i^3 \vec{G}_{e;k,i}(\vec{r} - \vec{r}') \otimes \hat{x}_i = \sum_i^3 \left[\left(1 + \frac{1}{k^2} \nabla(\nabla \cdot)\right) G_k(\vec{r}, \vec{r}') \hat{x}_i \right] \otimes \hat{x}_i. \quad (2.136)$$

Asimismo, dado que

$$\sum \hat{x}_i \otimes \hat{x}_i = \overleftrightarrow{I}$$

y de acuerdo con B.3 sabemos que:

$$\nabla \cdot \left[G_k(\vec{r} - \vec{r}') \overleftrightarrow{I} \right] = \nabla G_k(\vec{r} - \vec{r}') = \sum_j \frac{\partial G_k}{\partial x_j} \hat{x}_j.$$

Posteriormente, usando la definición del gradiente de una función vector (B.2), se tiene que:

$$\begin{aligned} \nabla \left[\nabla \cdot \left(G_k \overleftrightarrow{I} \right) \right] &= \nabla \left[\sum_j \frac{\partial G_k}{\partial x_j} \hat{x}_j \right] = \left(\sum_i \hat{x}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial G_k}{\partial x_j} \right] \right) \otimes \sum_j \hat{x}_j \\ \Rightarrow \boxed{\nabla \otimes \nabla G_k(\vec{r} - \vec{r}') = \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 G_k(\vec{r} - \vec{r}')}{\partial x_i \partial x_j} \right) \hat{x}_i \otimes \hat{x}_j}, \end{aligned} \quad (2.137)$$

donde se observa que el resultado corresponde a una función diádica. De esa manera la **función de Green diádica eléctrica en espacio libre** $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$ se puede reescribir de la forma:

$$\boxed{\overleftrightarrow{G}_{e;k}(\vec{r} - \vec{r}') = \left(\overleftrightarrow{I} + \frac{1}{k^2} \nabla \otimes \nabla \right) G_k(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (2.138)$$

donde $\nabla \otimes \nabla$ se ha usado para denotar la función diádica en términos de G_k que se especifica en (2.137), y el subíndice “k” adjunto a $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$ y G_k resalta la condición de **espacio libre**, el cual enfatizamos que se caracteriza por $k^2 = \omega^2 \epsilon(\omega) \mu(\omega)$ y **significa que en el entorno cercano no existen objetos de dispersión**.

Por otra parte, con base en la relación (2.44), donde se establece el campo magnético \vec{H} en términos del potencial vectorial \vec{A} , y el resultado en (2.134), se tiene que la **función de Green diádica magnética en espacio libre** $\overleftrightarrow{G}_{m;k}$ está dada por:

$$\boxed{\overleftrightarrow{G}_{m;k}(\vec{r} - \vec{r}') = \nabla \times \left[\overleftrightarrow{I} G_k(\vec{r}, \vec{r}') \right] = \left[\nabla G_k(\vec{r} - \vec{r}') \right] \times \overleftrightarrow{I}}, \quad (2.139)$$

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

donde se ha usado la identidad

$$\nabla \times \left(a \overleftrightarrow{b} \right) = a \nabla \times \overleftrightarrow{b} + (\nabla a) \times \overleftrightarrow{b}, \quad \text{con } a = G_k(\vec{r} - \vec{r}') \text{ y } \overleftrightarrow{b} = \overleftrightarrow{I}.$$

2.5.3. Clasificación de la función de Green diádica

La técnica de la función de Green diádica se introduce principalmente para formular varios problemas electromagnéticos canónicos de manera sistemática y, con ello, evitar tratamientos de diversos casos especiales los cuales pueden tratarse como un solo problema en general. Como ejemplo del tipo de problemas que se pueden abordar con base en este formalismo, en la Figura (2.6) se ilustran algunos problemas típicos, donde se muestra: (a) una fuente de corriente en presencia de una esfera conductora ubicada en un medio, (b) un cilindro conductor con una abertura que es excitada por alguna fuente de corriente dentro del cilindro, (c) una guía de ondas rectangular con una fuente de corriente colocada dentro de la guía, y (d) dos medios isotrópicos semi-infinitos en contacto, con una fuente de corriente colocada en una de las regiones. Para cada uno de estos problemas, se deberá garantizar que los campos electromagnéticos cumplan las condiciones de frontera correspondientes. Por ejemplo, en el caso de trabajar con una guía de ondas rectangular, se debe cumplir que las componentes tangenciales del campo eléctrico deben desaparecer en las paredes de la guía. Además, para cada tipo de problema, también es necesario analizar diferentes distribuciones de fuentes, de tal manera que cada distribución se trate como un caso especial. Por ejemplo, en el caso de la guía de ondas, se pueden considerar los casos en que esta sea excitada por un dipolo eléctrico transversal o un dipolo longitudinal o un dipolo magnético. Por último, cabe remarcar que si, por ejemplo, en la Figura (2.6)(a) la esfera no estuviera allí, solo es necesario contar con la función de Green diádica de espacio libre para estudiar el campo producido por diferentes distribuciones de la fuente de corriente en el medio y, por consiguiente, los campos electromagnéticos en estos casos son soluciones de las ecuaciones de onda vectorial que se introdujeron en (2.29) y (2.30).

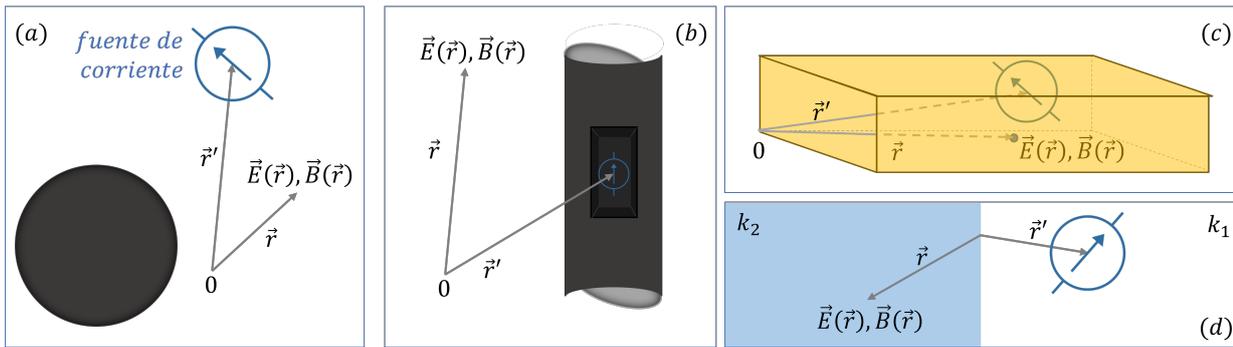


Figura 2.6: Ejemplos típico de problemas con condiciones de frontera.

En particular, para los problemas que involucran dos medios isotrópicos (Figura (2.6)(d)) se requiere resolver dos conjuntos de campos. Así, para diferenciar cada medio, denotamos el número de onda en estas dos regiones por medio de $k_1 = \omega(\mu_1\epsilon_1)^{1/2}$ y $k_2 = \omega(\mu_2\epsilon_2)^{1/2}$, respectivamente. Consecuentemente, para una fuente de corriente ubicada solo en la región 1, el conjunto de

ecuaciones de onda en el medio 1 está dada por:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}_1(\vec{r}) - k_1^2 \vec{E}_1(\vec{r}) = i\omega\mu \vec{J}_1(\vec{r}) \quad (2.140)$$

$$\nabla \times \nabla \times \vec{H}_1(\vec{r}) - k_1^2 \vec{H}_1(\vec{r}) = \nabla \times \vec{J}_1(\vec{r}), \quad (2.141)$$

mientras que para el medio 2 se tiene el conjunto de ecuaciones de onda está dado por:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}_2(\vec{r}) - k_2^2 \vec{E}_2(\vec{r}) = 0 \quad (2.142)$$

$$\nabla \times \nabla \times \vec{H}_2(\vec{r}) - k_2^2 \vec{H}_2(\vec{r}) = 0 \quad (2.143)$$

Como se ha mencionado anteriormente, para resolver el tipo de ecuaciones antes presentadas podemos usar las funciones de Green diádicas, ya que mediante estas se pueden encontrar las soluciones integrales de las ecuaciones de onda vectoriales no homogéneas (2.29, 2.30) de forma muy compacta. Acorde a la notación antes usada, \overleftarrow{G}_e y \overleftarrow{G}_m denotan las funciones de Green diádica eléctrica y magnética, respectivamente. Dichas funciones son las soluciones de las ecuaciones diferenciales diádicas dadas en (2.132) y (2.133). Consecuentemente, para calcular la solución integral de (2.29) se puede aplicar el Teorema de Green diada-vector de segundo tipo, el cual se aborda en la ecuación (B.12) del apéndice B. Así considerando $\vec{P} = \vec{E}(\vec{r})$ y $\overleftarrow{Q} = \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}')$ de acuerdo a la notación establecida, se obtiene:

$$\begin{aligned} & \iiint_V \left\{ \vec{E}(\vec{r}) \cdot \nabla \times \nabla \times \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') - \left[\nabla \times \nabla \times \vec{E} \right] \cdot \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \right\} dV \\ &= - \iint_S \hat{n} \cdot \left\{ \vec{E}(\vec{r}) \times \nabla \times \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') + \left[\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) \right] \times \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \right\} dS. \end{aligned}$$

Sustituyendo los resultados de las ecuaciones de onda vectorial (2.29) y (2.132), la ecuación integral se transforma de la forma:

$$\begin{aligned} & \iiint_V \left\{ \left[k^2 \vec{E}(\vec{r}) + i\omega\mu \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \right] \cdot \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') - \vec{E}(\vec{r}) \cdot \left[k^2 \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') + \overleftarrow{I} \delta(\vec{r}, \vec{r}') \right] \right\} dV \\ &= - \iint_S \hat{n} \cdot \left\{ \vec{E}(\vec{r}) \times \nabla \times \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') + \left[\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) \right] \times \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \right\} dS. \end{aligned}$$

En la expresión anterior, dos de los términos en la integral de volumen se eliminan uno a otro, además se usa el hecho de que:

$$\iiint_V \vec{E}(\vec{r}) \cdot \overleftarrow{I} \delta(\vec{r} - \vec{r}') dV = \iiint_V \vec{E}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') dV = \vec{E}(\vec{r}'),$$

de esta manera se obtiene:

$$\begin{aligned} & \vec{E}(\vec{r}') - i\omega\mu \iiint_V \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \cdot \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') dV \\ &= - \iint_S \hat{n} \cdot \left\{ \vec{E}(\vec{r}) \times \nabla \times \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') + \left[\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) \right] \times \overleftarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \right\} dS. \end{aligned}$$

Por otra parte, dado que sabemos que se cumple $\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) = i\omega\mu \vec{H}(\vec{r})$ usando la identidad de triple producto en el análisis diádico enunciada en (B.9), se puede reescribir la integral de

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

superficie de una manera alternativa, tal que:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}') &= i\omega\mu \iiint_V \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \cdot \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') dV \\ &= \oint_S \left\{ [i\omega\mu \vec{H}(\vec{r})] \cdot [\hat{n} \times \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}')] - [\hat{n} \times \vec{E}(\vec{r})] \cdot \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \right\} dS,\end{aligned}\quad (2.144)$$

Cabe señalar que en la ecuación (2.144) \vec{r}' es ahora la posición donde se observa el campo, mientras que \vec{r} representa la posición de la fuente puntual.

Una vez que se conoce $\vec{E}(\vec{r}')$, uno puede encontrar fácilmente $\vec{H}(\vec{r}')$ usando una de las ecuaciones de Maxwell. Sin embargo, para discutir la clasificación de las funciones de Green diádicas eléctricas que satisfacen diferentes condiciones de contorno, necesitamos una expresión integral para $\vec{H}(\vec{r}')$, que se puede obtener haciendo $\vec{P} = \vec{H}(\vec{r})$ y $\overleftrightarrow{Q} = \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}')$ en (B.9), de lo que, realizando un procedimiento análogo al realizado para el campo eléctrico, se obtiene:

$$\begin{aligned}\vec{H}(\vec{r}') &= \iiint_V \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \cdot \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') dV \\ &= \oint_S \left\{ \vec{H}(\vec{r}) \cdot [\hat{n} \times \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}')] - (\hat{n} \times [\nabla \times \vec{H}(\vec{r}) - \vec{J}_{ext}(\vec{r})]) \cdot \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \right\} dS.\end{aligned}$$

De manera análoga, usando la ecuación de Maxwell dada por $\nabla \times \vec{H}(\vec{r}) = \vec{J}_{ext}(\vec{r}) - i\omega\epsilon\vec{E}(\vec{r})$, se obtiene:

$$\begin{aligned}\vec{H}(\vec{r}') &= \iiint_V \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \cdot \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') dV \\ &= \oint_S \left\{ \vec{H}(\vec{r}) \cdot [\hat{n} \times \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}')] - i\omega\epsilon [\hat{n} \times \vec{E}(\vec{r})] \cdot \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \right\} dS.\end{aligned}\quad (2.145)$$

Es importante observar que, tanto en (2.144) como en (2.145), aún no hemos especificado la(s) superficie(s) que encierran el volumen de integración V , por lo que representan las ecuaciones integrales del campo electromagnético para el espacio libre.

Con la finalidad de comenzar a abordar casos con condiciones de frontera, es decir, donde existen diferentes medios, es necesario definir superficies o volúmenes sobre los cuales aplicar las ecuaciones integrales (2.144) y (2.145). En general, podemos comenzar considerando el caso de que la región está limitada interiormente por una superficie S_d y exteriormente en el infinito por una superficie S_∞ , como se ejemplifica en la Figura (2.7). En S_∞ , $\vec{E}(\vec{r})$ y $\vec{H}(\vec{r})$ satisfacen **la condición de radiación de Sommerfeld** (2.53); a saber,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left[\nabla \times \begin{Bmatrix} \vec{E}(\vec{r}) \\ \vec{H}(\vec{r}) \end{Bmatrix} - ik \hat{r} \times \begin{Bmatrix} \vec{E}(\vec{r}) \\ \vec{H}(\vec{r}) \end{Bmatrix} \right] = 0. \quad (2.146)$$

En consecuencia al requisito anterior, la función de Green vectorial $\vec{G}_{(e,m);k,j}$ con $j = 1, 2, 3$ satisface la misma condición que (2.146). Por consiguiente, combinando las tres ecuaciones

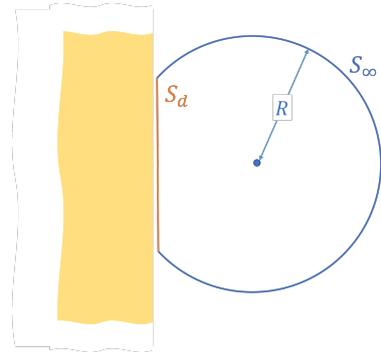


Figura 2.7: Ilustración ejemplo de superficies de integración

de $\vec{G}_{(e,m);k,j}$ para obtener la forma diádica, se obtiene que la **condición de radiación para la función de Green diádica eléctrica** $\overleftrightarrow{G}_{(e,m)}(\vec{r}, \vec{r}')$ está dada por:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left[\nabla \times \left\{ \begin{array}{c} \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \\ \overleftrightarrow{G}_m(\vec{r}, \vec{r}') \end{array} \right\} - ik \hat{r} \times \left\{ \begin{array}{c} \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \\ \overleftrightarrow{G}_m(\vec{r}, \vec{r}') \end{array} \right\} \right] = 0. \quad (2.147)$$

Como resultado de la condición de radiación, la integral de superficie en (2.144) y (2.145) evaluada en la superficie S_∞ es igual a cero, por lo que se tiene que solo S_d contribuye en la integral de superficie, por lo que se puede remplazar S por S_d .

Por consiguiente, en este punto del análisis se introduce la **clasificación de la función de Green diádica eléctrica, con el propósito de diferenciar el tipo de condiciones de frontera que debe satisfacer la función de Green en la superficie de frontera S_d** .

El primer caso a abordar corresponde a la **función de Green diádica de primer tipo**, denotada por $\overleftrightarrow{G}_{e,(1)}(\vec{r}, \vec{r}')$, la cual se caracteriza por satisfacer la **condición de Dirichlet diádica** en S_d , a saber:

$$\hat{n} \times \overleftrightarrow{G}_{e,(1)}(\vec{r}, \vec{r}') = 0. \quad (2.148)$$

Con base en esta condición, la integral en (2.144) se reduce a:

$$\vec{E}(\vec{r}') - i\omega\mu \iiint_V \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \cdot \overleftrightarrow{G}_{e,(1)}(\vec{r}, \vec{r}') dV = \iint_{S_d} \left[\hat{n} \times \vec{E}(\vec{r}) \right] \cdot \nabla \times \overleftrightarrow{G}_{e,(1)}(\vec{r}, \vec{r}') dS. \quad (2.149)$$

Particularmente, si la superficie S_d corresponde a la de un cuerpo **perfectamente conductor** como el que se muestra en la (2.6)(a), entonces se tiene que $\hat{n} \times \vec{E}(\vec{r}) = 0$ y la integral de superficie en S_d se anula completamente, por lo que se obtiene simplemente:

$$\vec{E}(\vec{r}') = i\omega\mu \iiint_V \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \cdot \overleftrightarrow{G}_{e,(1)}(\vec{r}, \vec{r}') dV \quad \text{con } \vec{r} \notin V, \quad (2.150)$$

donde se enfatiza que, para el caso de los dispersores con características de conductor perfecto, al conocer $\overleftrightarrow{G}_{e,(1)}(\vec{r}, \vec{r}')$ se puede calcular de manera directa el campo $\vec{E}(\vec{r}')$.

Por otra parte, para un cuerpo que es **parcialmente conductor**, como es el caso cilindro con una abertura que se muestra en la Figura (2.6)(b) donde no hay una fuente de corriente fuera del cilindro, la ecuación (2.144) se reduce a:

$$\vec{E}(\vec{r}') = \iint_{S_A} \left[\hat{n} \times \vec{E}(\vec{r}) \right] \cdot \nabla \times \overleftrightarrow{G}_{e,(1)}(\vec{r}, \vec{r}') dS, \quad (2.151)$$

donde S_A denota el área ocupada por la abertura en el cilindro. De esta manera, para este caso, una vez que es conocida la distribución del campo en la abertura, se puede calcular el campo fuera del cilindro a partir del conocimiento de $\overleftrightarrow{G}_{e,(1)}$, o más precisamente $\nabla \times \overleftrightarrow{G}_{e,(1)}(\vec{r}, \vec{r}')$.

El segundo caso a abordar corresponde a la **función de Green diádica de segundo tipo**, denotada por $\overleftrightarrow{G}_{e,(2)}(\vec{r}, \vec{r}')$, la cual se caracteriza por satisfacer la **condición de Neumann**

2. TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

diádica en S_d , a saber:

$$\hat{n} \times \left[\nabla \times \overleftrightarrow{G}_{e,(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \right] = 0. \quad (2.152)$$

Cuando la función $\overleftrightarrow{G}_{e,(2)}$ es usada en (2.145), se obtiene:

$$\vec{H}(\vec{r}') - \iiint_V \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \cdot \nabla \times \overleftrightarrow{G}_{e,(2)}(\vec{r}, \vec{r}') dV = -i\omega\epsilon \iint_{S_d} \left[\hat{n} \times \vec{E}(\vec{r}) \right] \cdot \overleftrightarrow{G}_{e,(2)}(\vec{r}, \vec{r}') dS. \quad (2.153)$$

Particularmente, para el caso en que se estudia un cuerpo **conductor perfecto** la integral de superficie se elimina, por lo que se obtiene

$$\vec{H}(\vec{r}') = \iiint_V \vec{J}_{ext}(\vec{r}) \cdot \nabla \times \overleftrightarrow{G}_{e,(2)}(\vec{r}, \vec{r}') dV. \quad (2.154)$$

Mientras que para un cuerpo **parcialmente conductor** con una apertura y una fuente de corriente fuera del cuerpo, la expresión (2.145) se reduce a:

$$\vec{H}(\vec{r}') = -i\omega\epsilon \iint_{S_d} \left[\hat{n} \times \vec{E}(\vec{r}) \right] \cdot \overleftrightarrow{G}_{e,(2)}(\vec{r}, \vec{r}') dS. \quad (2.155)$$

Cabe remarcar que la clasificación de la función de Green diádica magnética \overleftrightarrow{G}_m pues ser deducida de la relación que comparte con respecto a \overleftrightarrow{G}_e , establecida en (2.116) y (2.117).

Para finalizar, el último caso que se suele abordar corresponde al **problema de dos medios adyacentes, normalmente isotrópicos**, como es el caso que se ilustra en la Figura (2.6)(d). Esta configuración está asociado a las **funciones de Green diádica de tercer tipo**, las cuales requieren de una notación más elaborada con base en un superíndice con dos numerales. Dado que existen dos medios, en el caso de la función de Green de tercer tipo, existen cuatro clasificaciones del tipo eléctrico y otras cuatro para el tipo magnético, las cuales son indicadas por $\overleftrightarrow{G}_e^{(11)}$, $\overleftrightarrow{G}_e^{(21)}$, $\overleftrightarrow{G}_e^{(12)}$ y $\overleftrightarrow{G}_e^{(22)}$, o bien $\overleftrightarrow{G}_m^{(11)}$, $\overleftrightarrow{G}_m^{(21)}$, $\overleftrightarrow{G}_m^{(12)}$ y $\overleftrightarrow{G}_m^{(22)}$. Consecuentemente, para más de dos medios, **las funciones se denotarán por $\overleftrightarrow{G}_e^{(ij)}$ y $\overleftrightarrow{G}_m^{(ij)}$, donde i, j van desde uno hasta el número del medio, de tal manera que i denota el medio donde se resuelven las ecuaciones y j representa el medio en que se encuentra localizada la fuente**. Así, por ejemplo, el conjunto de ecuaciones (2.140)-(2.143) correspondería a la notación $\overleftrightarrow{G}_e^{(11)}$ y $\overleftrightarrow{G}_e^{(21)}$, respectivamente. En general, para las funciones de Green de tercer tipo se resuelven el conjunto de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e^{(ii)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \overleftrightarrow{G}_m^{(ii)}(\vec{r}, \vec{r}') \\ \nabla \times \overleftrightarrow{G}_m^{(ii)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \vec{I} \delta(\vec{r} - \vec{r}') + k_i^2 \overleftrightarrow{G}_e^{(ii)}(\vec{r}, \vec{r}') \\ \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e^{(ij)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \overleftrightarrow{G}_m^{(ij)}(\vec{r}, \vec{r}') \\ \nabla \times \overleftrightarrow{G}_m^{(ij)}(\vec{r}, \vec{r}') &= k^2 \overleftrightarrow{G}_e^{(ij)}(\vec{r}, \vec{r}'), \end{aligned}$$

con $i, j = 1, 2$ con $i \neq j$. Estas funciones se utilizan para integrar las ecuaciones de campo en las dos regiones. Para esto se usan las expresiones (2.21) y (2.22) para deducir que en la interfase entre los dos medios los campos electromagnéticos y, por consiguiente, las funciones de Green

correspondientes deben satisfacer las siguientes condiciones de frontera:

$$\hat{n}_i \times [\vec{E}_i(\vec{r}) - \vec{E}_j(\vec{r})] = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{n}_i \times \left[\overleftrightarrow{G}_e^{(ii)}(\vec{r}, \vec{r}') - \overleftrightarrow{G}_e^{(ji)}(\vec{r}, \vec{r}') \right] = 0 \quad (2.156)$$

$$\hat{n}_i \times [\vec{H}_i(\vec{r}) - \vec{H}_j(\vec{r})] = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{n}_i \times \left[\frac{\nabla \times \overleftrightarrow{G}_e^{(ii)}(\vec{r}, \vec{r}')}{\mu_i} - \frac{\nabla \times \overleftrightarrow{G}_e^{(ji)}(\vec{r}, \vec{r}')}{\mu_j} \right] = 0, \quad (2.157)$$

con $i \neq j$. De esta manera, con base en lo anterior, se procede usar un procedimiento análogo al caso de funciones de Green de primer tipo. En particular, en este caso se proponen la asociación $\vec{P} = \vec{E}_i(\vec{r}), \vec{E}_j(\vec{r}), \overleftrightarrow{Q} = \overleftrightarrow{G}_e^{(ii)}, \overleftrightarrow{G}_e^{(ji)}$ para hacer uso del Teorema de Green vector-diáda dado por la ecuación (B.12) del apéndice B. Así, usando dicho teorema se obtiene:

$$\vec{E}_i(\vec{r}') = i\omega\mu_i \iiint_{V_i} \vec{J}_i^{ext}(\vec{r}) \cdot \overleftrightarrow{G}_e^{(ii)}(\vec{r}, \vec{r}') dV \quad (2.158)$$

$$\vec{E}_j(\vec{r}') = i\omega\mu_j \iiint_{V_j} \vec{J}_i^{ext}(\vec{r}) \cdot \overleftrightarrow{G}_e^{(ji)}(\vec{r}, \vec{r}') dV, \quad (2.159)$$

donde \vec{E}_i es el campo eléctrico en la región que contiene la densidad de corriente externa \vec{J}_i^{ext} y, por consiguiente, \vec{E}_j es el campo eléctrico en el medio sin fuentes externas. Además, es posible demostrar simetría entre $\overleftrightarrow{G}_e^{(ij)}$ y $\overleftrightarrow{G}_e^{(ji)}$ para deducir los cuatro diferentes casos de las funciones de Green de tercer tipo.

En síntesis, con base en el formalismo introducido en esta sección, es concebible que el campo debido a cualquier distribución de corriente se pueda encontrar por cuadratura. De esta manera, el formalismo desarrollado se aplica a la simulación de sistemas reales al imponer las condiciones de contorno por medio de la elección de un tipo de las funciones de Green diádicas definida en este capítulo.

Métodos Teóricos en la óptica a la Nanoescala

El campo de la Nanofotónica se encarga del estudio de la interacción luz-materia a la nanoescala. En esta ciencia, los sistemas periódicos fuertemente acoplados a medios activos son de suma importancia, ya que sirven como metasuperficies emisoras de luz con propiedades de emisión personalizadas en función de su diseño. Además, estos sistemas se exhiben como una plataforma atractiva para probar conceptos físicos novedosos; así mismo, se proyectan como sistemas viables para la realización de funciones de modelado de luz sin precedentes.

En este contexto, un problema importante de la nanofotónica es la determinación de las distribuciones de campos electromagnéticos cerca de las estructuras a nanoescala y las propiedades de radiación asociadas. Una sólida comprensión teórica de las distribuciones de campo promete diseños nuevos y optimizados de dispositivos ópticos de campo cercano, en particular mediante la explotación de efectos de mejora de campo y esquemas de detección favorables. Los cálculos de distribuciones de campo también son necesarios para fines de reconstrucción de imágenes. Los campos cercanos a las estructuras a nanoescala a menudo tienen que reconstruirse a partir de datos de campo lejano accesibles experimentalmente. Sin embargo, lo más común es que el problema de dispersión inversa no se pueda resolver de una manera única y, por consiguiente, se necesiten cálculos de distribuciones de campo para proporcionar un conocimiento previo sobre los objetos fuente y de dispersión, de tal manera que se restringe el conjunto de posibles soluciones.

Formalmente, las soluciones analíticas de las ecuaciones de Maxwell modelan por completo los fenómenos electromagnéticos involucrados en la interacción luz-materia, sin embargo, dichas soluciones solo se pueden obtener analíticamente para problemas simples, porque de lo contrario los problemas tienen que ser fuertemente simplificados para obtener expresiones analíticas. Por otra parte, el análisis numérico puro nos permite manejar problemas más complejos mediante la discretización del espacio y el tiempo. Desafortunadamente, para estos últimos, es necesario considerar requisitos computacionales, los cuales suelen limitar el tamaño del sistema. Además, a menudo se desconoce la precisión de los resultados obtenidos. Sin embargo, se usan comúnmente debido a la facilidad de implementación, como sucede con el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) o el método de elementos finitos (FEM).

Por otra parte, existen los métodos semi-analíticos que, si bien requieren de algunos cálculos computacionales, se fundamentan en estudios teóricos de los sistemas de estudios, permitiendo una comprensión teórica del sistema. Hay dos métodos semi-analíticos de uso común en la óptica a escala nanométrica: el método multipolar múltiple (MMP) y el método integral de volumen. De este último existen diferentes implementaciones como el método del dipolo acoplado o el método de momentos [22]. Tanto MMP como el método integral de volumen son métodos semianalíticos, ya que generan una expansión analítica del campo electromagnético por medios numéricos.

3.1. Método Numérico. Elemento finito (FEM)

Como se sabe, la respuesta electromagnética de los materiales puede ser modelada, generalmente, por medio de la permitividad eléctrica $\epsilon(\omega)$ y la permeabilidad magnética $\mu(\omega)$. Al resolver la ecuación (2.29) se obtiene la información de todos los fenómenos electromagnéticos involucrados.

Uno de los métodos numéricos más usados actualmente para resolver ecuaciones diferenciales parciales es el Método de Elementos Finitos (FEM por las siglas en inglés Finite Element Method). En dicho método se discretiza el espacio por medio de un mallado triangular, el cual permite adaptarse a una gran variedad de geometrías de nanoestructuras. A partir de los nodos de la malla y considerando un principio variacional para la convergencia de la solución, es posible aproximar los valores de la ecuación diferencial a resolver.

Como se explica en la referencia [23], el método se basa en que es posible encontrar la solución de la ecuación diferencial encontrando una función que minimice la función variacional asociada a la ecuación diferencial original. Un ejemplo de esto es la ecuación:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = f(x), \quad (3.1)$$

cuya solución $u(x)$ se calcula minimizando la función variacional $J(u)$ asociada, dada por:

$$J[u] = \int \left[\frac{1}{2} \left(\frac{du(x)}{dx} \right)^2 + f(x)u(x) \right] dx. \quad (3.2)$$

Una posible interpretación física de la solución $u(x)$ asociada a la ecuación (3.1), consiste en considerar a $u(x)$ como el espacio de configuraciones del sistema, debido a la fuerza $f(x)$ aplicada sobre un cuerpo. Un ejemplo más concreto, si interpretamos a la función (3.1) por medio de la segunda ley de Newton, es posible comparar el integrando de la ecuación (3.2) con la definición de energía potencial y, por lo tanto, se deduce que la función variacional $J(u)$ representa la energía total del sistema. En consecuencia, debido al principio variacional de mínima acción, se corrobora que la solución $u(x)$ debe ser tal que el valor $J(u)$ se minimice. Ahora bien, retomando una perspectiva general del método, una vez determinada la función variacional asociada al tipo de problema a resolver, se procede a discretizar el espacio usando elementos con geometría triangular (observar Figura 3.1). Así, en la región delimitada por cada elemento, se resolverá numéricamente el valor de u .

En particular, para la implementación de FEM se puede usar el método de Ritz [24], el cual consiste en proponer una función u que cumpla las condiciones de frontera de cada elemento de la malla y para esto, con base en el elemento ilustrado en la Figura 3.1, se propone:

$$u = N_1 u_1 + N_2 u_2 + N_3 u_3, \quad (3.3)$$

donde u_i corresponde a los valores de la función en los nodos del elemento (observar Figura 3.1) y N_i son funciones de interpolación que se proponen según el problema, por ejemplo, funciones polinomiales, lineales, etcétera.

Ahora bien, con base en la interpretación física de la función variacional asociada y la sustitución propuesta en (3.3), los parámetros a determinar en el FEM corresponden al valor de la

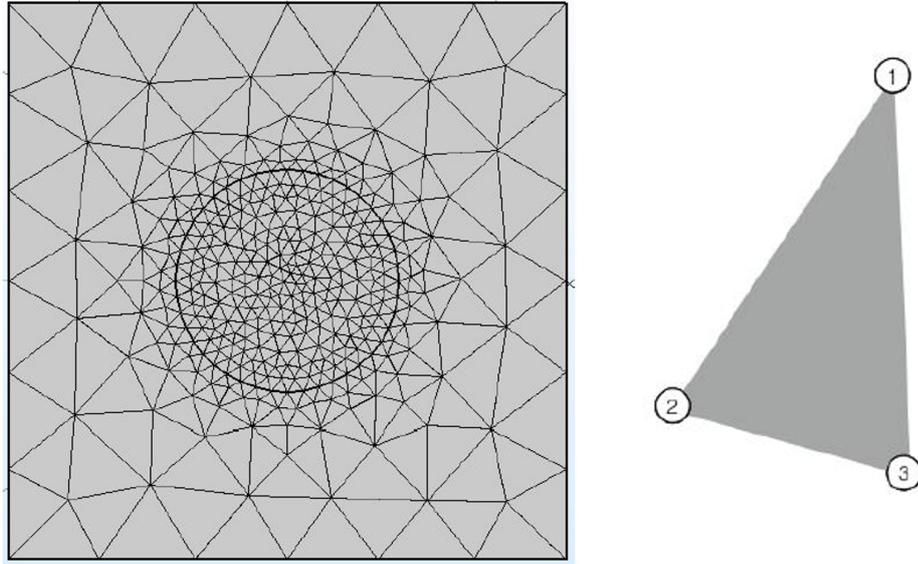


Figura 3.1: Esquemas extraídos de la referencia [23]. Del lado izquierdo de la imagen se muestra un ejemplo de mallado triangular para un círculo y sus alrededores, mientras que del lado derecho se esquematiza un elemento definido por la red, en cuya región debe resolverse la ecuación (3.1).

función de los nodos tales que se minimice el valor de la funcional, es decir, se calculan los u_i tales que se resuelve:

$$\frac{\partial J}{\partial u_i} = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, 3,$$

Así, considerando que diversos elementos del mallado comparten un mismo nodo y con base a las ecuaciones acopladas para determinar los valores de u_i en los nodos de un elemento que resultan de la condición anterior, se obtiene un sistema de ecuaciones acopladas para determinar de manera aproximada el valor de la función u en los nodos de la malla.

La aplicación de este método numérico suele ser automatizado en software comercial. Un ejemplo de este es el programa de $\text{\textcircled{R}}\text{COMSOL}$ Multiphysics, el cual se utilizó en esta tesis para usar el Método de Elemento Finito para analizar la respuesta óptica del cristal plasmónico.

3.2. Métodos Semi-analíticos

Como se mencionó anteriormente, en general es difícil estudiar sistemas de gran tamaño o sistemas que estén compuesto de un gran número de elementos que interactúen entre sí. En consecuencia, dependiendo de la complejidad del sistema estudiado, no siempre es posible obtener soluciones analíticas del problema. En caso como estos, utilizamos métodos semianalíticos que proporcionen una solución aproximada al problema. En este tipo de métodos, las soluciones se buscan en términos de la superposición de los componentes del sistema. Los métodos semi-analíticos se basan en encontrar la solución del problema con base en las condiciones iniciales y condiciones de frontera que debe satisfacer el sistema, o bien en términos de suposiciones sobre el comportamiento esperado del sistema.

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

En el campo del estudio de la respuesta óptica de estructuras a la nanoescala se destacan dos clasificaciones de métodos semianalíticos (observar Figura 3.2). Por una parte se encuentra el método multipolar múltiple, usado para el estudio de sistemas modelados en términos de un número finito de dominios con propiedades ópticas definidas, de tal manera que este método suele usarse para el estudio de estructuras extendidas.

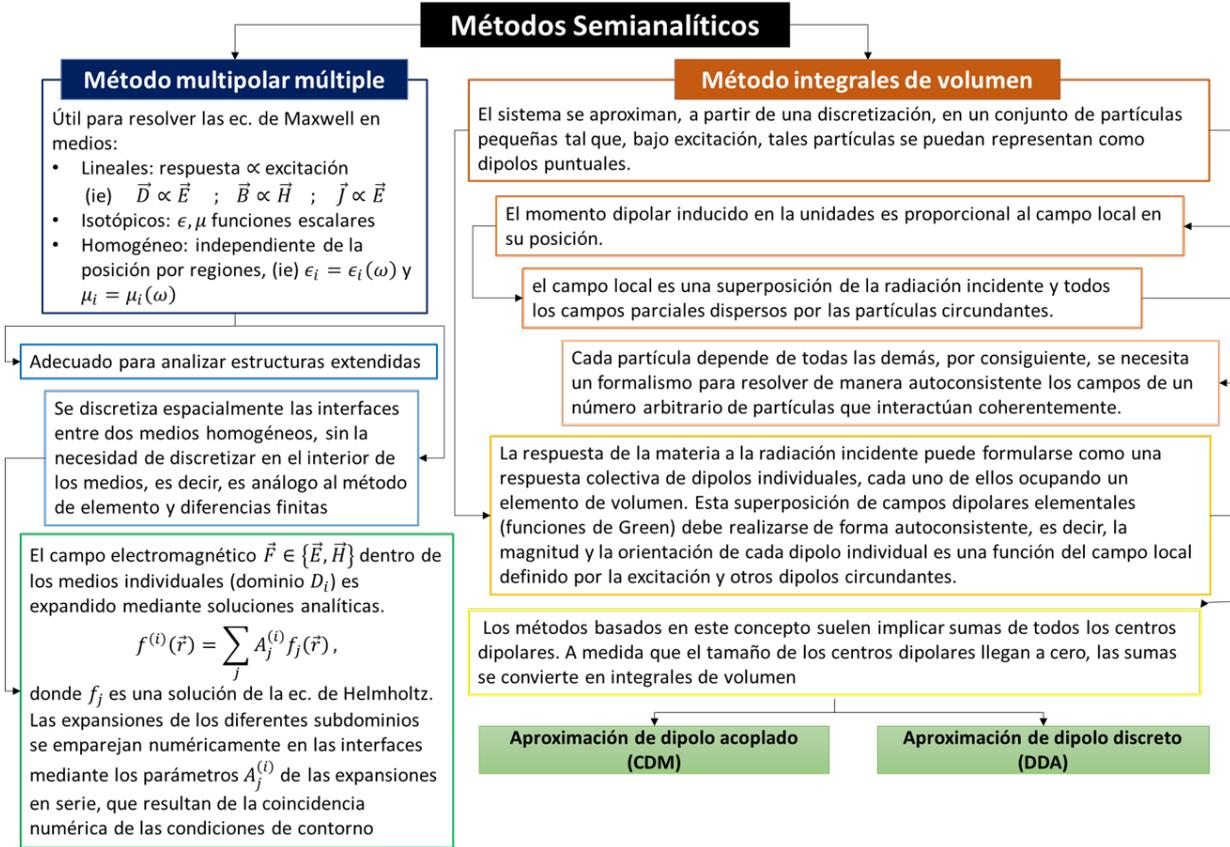


Figura 3.2: Esquema de algunos métodos semianalíticos para estudiar la respuesta óptica de nanoestructuras

Por otra parte, se encuentra el método de integrales de volumen, en el cual se modela al sistema en términos de partículas de menor tamaño, las cuales posean una respuesta dipolar al interactuar con el campo eléctrico externo y la interacción mutua entre ellas. En consecuencia, la respuesta del material a la radiación incidente puede formularse como una respuesta colectiva de dipolos individuales, cada uno de ellos ocupando un elemento de volumen. Esta superposición de campos producidos por dipolos elementales (funciones de Green) debe realizarse de forma autoconsistente, es decir, la magnitud y la orientación de cada dipolo individual es una función del campo local definido por la excitación y otros dipolos circundantes. Los métodos basados en este concepto suelen implicar sumas de todos los centros dipolares. En el límite, a medida que el tamaño de los centros dipolares llega a cero, las sumas se convierten en integrales de volumen. Por lo tanto, estos formalismos se denominan métodos integrales de volumen.

Es preciso mencionar que existe un punto de vista tanto microscópico como macroscópico para básicamente el mismo formalismo. Mientras que en el primero, las partículas microscópicas

dipolares se unen para formar un conjunto macroscópico, el segundo considera un objeto macroscópico que se divide en pequeñas subunidades homogéneas. En la literatura es común que el método que sigue el punto de vista microscópico se asocia al método de aproximación de dipolo discreto (DDA, por sus siglas en inglés) y el método que sigue el punto de vista macroscópico a la aproximación de dipolos acoplados (CDA, por sus siglas en inglés).

En el presente trabajo, se abordará el método de dipolo acoplado para el estudio de cristales plasmónicos. Para esto se considerará que cada nanopartícula que compone al sistema se puede modelar como un dipolo eléctrico y, de esta manera, se podrá implementar el métodos semi-analítico de dipolos acoplados para aproximar la respuesta óptica del cristal plasmónico. Para este cometido, primero introduciremos un panorama general de la ecuación integral de volumen usada en la implementación de los Métodos integrales de volumen. Posteriormente se desarrollará el enfoque particular de dipolos acoplados.

3.2.1. Ecuación integral de Volumen

Como se mencionó previamente, en el método de integrales de volumen se modela la respuesta de un sistema en términos de partículas de menor tamaño, de tal manera que cada componente posee una respuesta dipolar al interactuar con los campos electromagnéticos incidentes. Esta suposición con respecto a la respuesta dipolar nos permite emplear el formalismo desarrollado en la sección 2.5.1, el cual se derivó con base en la propuesta de una densidad de corriente de dipolo eléctrico puntual (2.107), a saber:

$$\vec{J}_j^{ext} = c_j \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{x}_j \quad \text{con} \quad i\omega\mu c_j = 1.$$

Con base en esta densidad se introdujeron las funciones de Green diádica de tipo eléctrico \overleftrightarrow{G}_e y de tipo magnético \overleftrightarrow{G}_m , las cuales resolvían el campo eléctrico diádico \overleftrightarrow{E} y el campo magnético diádico \overleftrightarrow{H} por medio de las definiciones del caso dipolar dadas en (2.111) y (2.112), respectivamente. Más aún, en la sección 2.5.2 se calcularon las ecuaciones (2.138) y (2.139) en las cuales se establecía la relación entre las funciones de Green en espacio libre en su forma diádica y la función de Green escalar en el espacio libre G_k , a saber:

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{G}_{e;k}(\vec{r}, \vec{r}') &= \left(\overleftrightarrow{I} + \frac{1}{k^2} \nabla \otimes \nabla \right) G_k(\vec{r}, \vec{r}') \\ \overleftrightarrow{G}_{m;k}(\vec{r}, \vec{r}') &= \nabla \times \left[\overleftrightarrow{I} G_k(\vec{r}, \vec{r}') \right] = [\nabla G_k(\vec{r}, \vec{r}')] \times \overleftrightarrow{I} \end{aligned}$$

Asimismo, como se mencionó en esa misma sección, si uno conoce los campos electromagnéticos de tres dipolos eléctricos infinitesimales ortogonales, es concebible que el campo debido a cualquier distribución de corriente se pueda encontrar por cuadratura. Fue así que, usando los teoremas de Green en su versión diada-vector e imponiendo condiciones de frontera, se determinaron las ecuaciones (2.150) y (2.154), o bien (2.158) y (2.159), en las cuales se resuelven los campos eléctricos y magnéticos en términos de la función de Green diádica de tipo eléctrico, a saber.

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) &= i\omega\mu \iiint_{V'} \vec{J}_{ext}(\vec{r}') \cdot \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') dV' \quad \text{con} \quad \vec{r} \notin V' \\ \vec{H}(\vec{r}) &= \iiint_{V'} \vec{J}_{ext}(\vec{r}') \cdot \nabla \times \overleftrightarrow{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') dV' \quad \text{con} \quad \vec{r} \notin V', \end{aligned}$$

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

donde \overleftrightarrow{G}_e puede representar la función de Green de primer tipo, para el exterior de un material conductor, o de tercer tipo para el caso de dos medios homogéneos adyacentes.

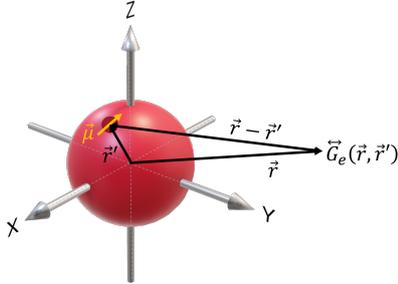


Figura 3.3: Ilustración de la función de Green Diádica $\overleftrightarrow{G}_{e;k}(\vec{r}, \vec{r}')$.

Cabe remarcar que las expresiones de los campos fueron obtenidas para un punto de observación \vec{r} fuera del objeto de esparcimiento ($\vec{r} \notin V'$), por lo que el formalismo a continuación es propuesto para resolver el campo en el espacio.

Consecuentemente, al sustituir $\vec{J}_{ext}(\vec{r}')$ en las ecuaciones (2.150) y (2.154) se obtienen ecuaciones integrales implícitas para los campos $\vec{E}(\vec{r})$ y $\vec{H}(\vec{r})$. Estas ecuaciones se denotan como **ecuaciones integrales de volumen** para los campos eléctrico y magnético y forman la base para los métodos integrales de volumen, particularmente para el método de momentos. Un esquema del procedimiento de resolución se muestra en la Figura 3.3, donde \vec{r}' y \vec{r} representa la posición de la fuente y el punto de observación, respectivamente. Las tres columnas de $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$ denotan el campo eléctrico de las tres orientaciones canónicas del

dipolo.

3.2.2. Método de momentos

Profundizando en el formalismo de la sección anterior propuesto para calcular el campo eléctrico y magnético producido por una distribución de carga localizada, es importante observar que hasta el momento no hemos proporcionado una expresión analítica de la función de Green diádica \overleftrightarrow{G}_e usada para el cálculo de las ecuaciones de volumen propuestas en la sección anterior. Esto se debe a que las condiciones de frontera impuestas, como por ejemplo en (2.148), se especifican en términos del vector normal a la superficie \hat{n} , por lo que el elección del tipo de función de Green diádica depende de la geometría de las condiciones de frontera. En consecuencia, para abordar un caso particular y obtener una expresión de la función de Green diádica es necesario realizar un análisis del problema en función de la geometría del sistema. Por consiguiente, a continuación, describiremos los fundamentos de los potenciales de Debye para la obtención de la expansión multipolar de la función de Green diádica. A su vez, este formalismo nos será útil para modelar la respuesta óptica de problemas con simetría esférica, como se demostrar en la deducción de la solución de Mie.

3.2.2.1. Potenciales de Debye

Para abordar la solución de la función de Green diádica en coordenadas esféricas podemos usar los resultados de la sección 2.4 para la expansión de la función de Green escalar en coordenadas esféricas, ya que sabemos que sus soluciones permiten resolver los campos vectoriales eléctrico y magnético por medio del método de potenciales.

Primero recordemos que la función de Green de la ecuación de Helmholtz escalar en el espacio libre resolvía la ecuación (2.45), a saber:

$$(\nabla^2 + k^2) G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Como mencionamos anteriormente, esta solución se usa para resolver los campos eléctricos y magnéticos por medio de potenciales. Por otra parte, con base en el trabajo de Debye en la referencia [25], se observa que la libertad que existe para elegir un potencial vectorial, particularmente mediante un cambio de norma, es quizás una indicación de que los mismísimos campos eléctricos y magnéticos puedan derivarse de solo dos funciones escalares; si no en general, al menos para casos especiales. De esta manera, Debye, en la ya mencionada referencia, propuso como solución del problema en espacio libre, que los campos estuvieran dados por:

$$\vec{E} = \nabla \times \nabla \times (\vec{r} \Pi_1) + ik \nabla \times (\vec{r} \Pi_2) \quad (3.4)$$

$$\vec{H} = -ik \nabla \times (\vec{r} \Pi_1) + \nabla \times \nabla \times (\vec{r} \Pi_2), \quad (3.5)$$

donde Π_1 y Π_2 correspondían a dos funciones escalares. Esta solución fue estudiada y explicada con mayor accesibilidad por Bouwkamp y Casimir en la referencia [26], como se resume a continuación. Para esto propusieron definir el espacio libre con base en una esfera de radio R , de tal manera que la magnitud de R permitiera encerrar por completo las cargas y corrientes en el espacio (observar Figura 3.4). De esta manera, para todos los puntos externos a la esfera R , el campo producido por las corriente \vec{J}_{ext} puede ser concebido de una superposición de campos multipolares eléctricos y magnéticos, cuyas fuentes están localizadas en el centro de la esfera R .

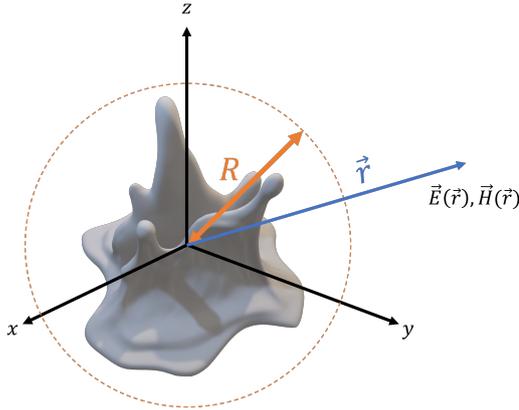


Figura 3.4: Sistema de estudio

Particularmente, la teoría desarrollada por Bouwkamp y Casimir se basa en las propiedades simples de los productos $\vec{r} \cdot \vec{E}$ y $\vec{r} \cdot \vec{H}$, a saber:

1. Determinan los campos, externos a la esfera R , de manera única.
2. Tienen representaciones de fuentes simples.
3. Son soluciones de la ecuación de onda homogénea en el espacio libre.
4. Están estrechamente relacionadas y son inmediatamente encontradas a partir de los potenciales de Debye.

Para la primera propiedad los autores describen un teorema de unicidad en el exterior de la esfera R , cuyo enunciado es: *Consideremos los campos electromagnéticos analíticos \vec{E} y \vec{H} , en un dominio D cuyas fronteras corresponden a esferas concéntricas de radio mayor a R , con componentes radiales E_r y H_r que se desvanecen. Entonces, los campos \vec{E} y \vec{H} son idénticamente cero.* Para dicha demostración, debido a que las condiciones contempla un dominio sin fuentes en su interior, se parte del caso homogéneo asociado a la ecuación de onda vectorial de los campos (2.29) y (2.30) y, dada la simetría de las condiciones de frontera, se expresan los operadores en coordenadas esféricas para hacer explícita de la suposición de componente radiales evanescente. Dada la simplificación del problema bajo dichas suposiciones, se pueden resolver las ecuaciones diferenciales obtenidas y aplicar el Teorema de Liouville, de variable compleja, para demostrar que los campos deben ser idénticamente cero.

Como consecuencia del teorema, se tiene que **cualquier campo electromagnético, que satisfaga las ecuaciones de Maxwell en el espacio vacío entre dos esferas concéntricas, están completamente determinado por sus componentes radiales E_r y H_r .** Por lo tanto,

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

el análisis de los campos electromagnéticos en el espacio libre, se puede restringir al estudio de los productos $\vec{r} \cdot \vec{E}$ y $\vec{r} \cdot \vec{H}$.

Posteriormente, para hacer explotar la propiedad 2., se usa la identidad diferencial $(\nabla^2 + k^2)(\vec{r} \cdot \vec{F}) = 2\nabla \cdot \vec{F} + \vec{r} \cdot [\nabla(\nabla \cdot \vec{F}) - (\nabla \times \nabla \times \vec{F} - k^2 \vec{F})]$ para obtener que las componentes radiales cumplen las ecuaciones:

$$(\nabla^2 + k^2)(\vec{r} \cdot \vec{H}) = -\vec{r} \cdot \nabla \times \vec{J}_{ext} \quad (3.6)$$

$$(\nabla^2 + k^2)(\vec{r} \cdot \vec{E}) = \frac{2}{\epsilon} \rho + \frac{1}{\epsilon} \vec{r} \cdot \nabla \rho - i\omega\mu \vec{r} \cdot \vec{J}_{ext}.$$

$$\Rightarrow (\nabla^2 + k^2) \left(\vec{r} \cdot \left[\vec{E} - \frac{1}{i\omega\epsilon} \vec{J}_{ext} \right] \right) = \frac{i}{\omega\epsilon} \vec{r} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{J}_{ext}. \quad (3.7)$$

En consecuencia, usando el método de Green propuesto en (2.52), para resolver los productos se tiene que:

$$\vec{r} \cdot \vec{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{i\omega\epsilon(\omega)} \vec{r} \cdot \vec{J}_{ext}(\omega) - \frac{i}{\omega\epsilon(\omega)} \int G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\vec{r}' \cdot \nabla' \times \nabla' \times \vec{J}_{ext}(\vec{r}', \omega) \right) dV' \quad (3.8)$$

$$\vec{r} \cdot \vec{H}(\mathbf{r}, \omega) = \int G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\vec{r}' \cdot \nabla' \times \vec{J}_{ext}(\vec{r}', \omega) \right) dV' \quad (3.9)$$

Ahora bien, para los puntos exteriores a la esfera podemos expandir la función de Green en funciones propias de la ecuación de onda. Para esto, podemos retomar los resultados de la sección 2.4, particularmente los resultados en (2.71), (2.78) y (2.97), donde se obtuvo que la función de Green de la ecuación de Helmholtz en espacio libre está dada por:

$$G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = ik \sum_n^{\infty} j_n(kr_{<}) h_n^{(1)}(kr_{>}) \sum_{m=-n}^n Y_n^m(\theta, \varphi) Y_n^{m*}(\theta', \varphi')$$

$$\Rightarrow G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = ik \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \Pi_n^{-m}(\vec{r}') \Pi_n^m(\vec{r}) \quad \text{para } r' < r \quad (3.10)$$

con

$$\Pi_n^m(\vec{r}) = h_n^{(1)}(kr) Y_n^m(\theta, \varphi) \quad y \quad \Pi_n^{-m}(\vec{r}') = j_n(kr') Y_n^{m*}(\theta', \varphi') \quad (3.11)$$

Sustituyendo en las expresiones integrales (3.8) y (3.9), así como usando la identidad de la divergencia de un rotacional y el teorema de Gauss con condiciones de frontera para simplificar las expresiones, se obtiene que:

$$\vec{r} \cdot \vec{E}(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{k}{\omega\epsilon(\omega)} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \Pi_n^m(\vec{r}) \int \vec{J}_{ext}(\vec{r}') \cdot \nabla' \times \nabla' \times (\vec{r}' \Pi_n^{-m}(\vec{r}')) dV'. \quad (3.12)$$

$$\vec{r} \cdot \vec{H}(\mathbf{r}, \omega) = ik \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \Pi_n^m(\vec{r}) \int \vec{J}_{ext}(\vec{r}') \cdot \nabla' \times (\vec{r}' \Pi_n^{-m}(\vec{r}')) dV'. \quad (3.13)$$

Con base en lo anterior, se pueden definir dos funciones escalares dividiendo términos sucesivos en la serie (3.12) y (3.13) por $n(n+1)$, donde se puede mostrar que las funciones así obtenidas son los potenciales de Debye pertenecientes al campo electromagnético producido por las corrientes

\vec{J}_{ext} dadas, a saber:

$$\Pi_1(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{k}{\omega\epsilon(\omega)} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{1}{n(n+1)} \Pi_n^m(\vec{r}) \int \vec{J}_{ext}(\vec{r}') \cdot \nabla' \times \nabla' \times (\vec{r}' \Pi_n^{-m}(\vec{r}')) dV'. \quad (3.14)$$

$$\Pi_2(\mathbf{r}, \omega) = ik \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{1}{n(n+1)} \Pi_n^m(\vec{r}) \int \vec{J}_{ext}(\vec{r}') \cdot \nabla' \times (\vec{r}' \Pi_n^{-m}(\vec{r}')) dV'. \quad (3.15)$$

Por lo tanto, podemos definir un campo eléctrico multipolar de grado n y orden m , en términos de la combinación de los vectores \vec{E} y \vec{H} propuestos por Debye en las ecuaciones (3.4) y (3.5), haciendo $\Pi_1 = \Pi_n^m$ y $\Pi_2 = 0$. De manera similar, el campo magnético multipolar de grado n y orden m es la combinación de los vectores \vec{E} y \vec{H} que se obtiene haciendo $\Pi_1 = 0$ y $\Pi_2 = \Pi_n^m$. En otras palabras, (n, m) -polos producen los campos usando las expresiones de los campos:

$$\text{Multipolo Eléctrico: } \vec{E} = \nabla \times \nabla \times (\vec{r} \Pi_n^m) \quad \vec{H} = -ik \nabla \times (\vec{r} \Pi_n^m) \quad (3.16)$$

$$\text{Multipolo Magnético: } \vec{H} = \nabla \times \nabla \times (\vec{r} \Pi_n^m) \quad \vec{E} = ik \nabla \times (\vec{r} \Pi_n^m), \quad (3.17)$$

convención que también coincide con la referencia [27], comprobando consistencia. Estos campos multipolares satisfacen las ecuaciones de Maxwell homogéneas excepto en el origen de coordenadas y también obedecen a la condición de radiación de Sommerfeld en el infinito. Más aún, de las relaciones (3.16) y (3.17) identificamos que las propiedades de los campos multipolares depende del comportamiento de las funciones $\nabla \times (\vec{r} \Pi_n^m)$ y $\nabla \times \nabla \times (\vec{r} \Pi_n^m)$, y éstas se encuentra comúnmente denotadas en la literatura por los símbolos \vec{M} y \vec{N} , respectivamente.

Cabe mencionar que el procedimiento desarrollado anteriormente puede ser reproducido para otro tipo de coordenadas, como ejemplo de ello, en el caso de las coordenadas cilíndricas el desarrollo da como resultado los potenciales hertzianos.

Finalmente, dado que sabemos que el campo total producido es la superposición de todas las contribuciones multipolares, una vez establecido el sistema de coordenadas y definido un conjunto base apropiado para la descripción de los campos multipolares, podemos preguntarnos cómo se puede calcular los coeficientes de expansión multipolar. Para calcular dichos coeficientes es necesario obtener una expresión explícita de las funciones \vec{M} y \vec{N} antes mencionadas, procedimiento para el cual se puede usar el Método de Ohm-Rayleigh. Dicho procedimiento se detalla en la siguiente sección para el caso particular de coordenadas esféricas.

3.2.2.2. Expansión en funciones propias de la función de Green Diádica en el espacio libre

Con base en el potencial Π_n^m definido en (B.14), proponemos la definición de la función ψ de la forma:

$$\psi_{pmn}(\vec{r}; \kappa) = j_n(\kappa r) P_n^m(\cos \theta) \begin{cases} \cos(m\varphi) & \text{si } p = e \text{ función par (even)} \\ \sin(m\varphi) & \text{si } p = o \text{ función impar (odd)} \end{cases}, \quad (3.18)$$

donde κ representa una variable de espectro continuo útil para la expansión en funciones propias como se expuso en la sección 2.4.0.1. Ahora bien, la definición de las funciones en (3.18) nos permitirá estudiar y explotar de manera independiente las propiedades de simetrías de la función escalar Π_n^m , las cuales se heredan de las funciones trigonométricas y de las funciones especiales

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

de Legendre intrínsecas en la definición de los armónicos esféricos (2.73). De esta manera, en la expresión (3.18) el subíndice $p = e$ y $p = o$ denota la definición de la función ψ que posee propiedades de función par e impar, respectivamente. Ahora bien, de acuerdo con la definición de las funciones \vec{M} y \vec{N} mencionadas en la sección anterior, también se tiene:

$$\vec{M}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) = \nabla \times (\vec{r} \psi_{pmn}(\vec{r}; \kappa)) \quad (3.19)$$

$$\vec{N}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) = \frac{1}{\kappa} \nabla \times \nabla \times (\vec{r} \psi_{pmn}(\vec{r}; \kappa)) . \quad (3.20)$$

Estas funciones satisfacen la relación de simetría

$$\begin{aligned} \vec{N}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) &= \frac{1}{\kappa} \nabla \times \vec{M}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) , \\ \vec{M}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) &= \frac{1}{\kappa} \nabla \times \vec{N}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) . \end{aligned}$$

Consecuentemente, usando (3.18) y el operador $\nabla \times$ en coordenadas esféricas, es posible calcular las expresiones de la funciones \vec{M} y \vec{N} de manera explícita las cuales, de acuerdo a la referencia [18], están dadas por:

$$\vec{M}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) = \begin{cases} -\frac{m}{\sin\theta} j_n(\kappa r) P_n^m(\cos\theta) \sin(m\varphi) \hat{\theta} - j_n(\kappa r) \frac{\partial P_n^m(\cos\theta)}{\partial\theta} \cos(m\varphi) \hat{\varphi} & p = e \\ +\frac{m}{\sin\theta} j_n(\kappa r) P_n^m(\cos\theta) \cos(m\varphi) \hat{\theta} - j_n(\kappa r) \frac{\partial P_n^m(\cos\theta)}{\partial\theta} \sin(m\varphi) \hat{\varphi} & p = o \end{cases} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \vec{N}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) &= \begin{cases} \frac{n(n+1)}{\kappa r} j_n(\kappa r) P_n^m(\cos\theta) \cos(m\varphi) \hat{r} + \frac{1}{\kappa r} \frac{\partial}{\partial r} [r j_n(\kappa r)] \frac{\partial P_n^m(\cos\theta)}{\partial\theta} \cos(m\varphi) \hat{\theta} \\ \frac{n(n+1)}{\kappa r} j_n(\kappa r) P_n^m(\cos\theta) \sin(m\varphi) \hat{r} + \frac{1}{\kappa r} \frac{\partial}{\partial r} [r j_n(\kappa r)] \frac{\partial P_n^m(\cos\theta)}{\partial\theta} \sin(m\varphi) \hat{\theta} \\ -\frac{1}{\kappa r} \frac{\partial}{\partial r} [r j_n(\kappa r)] \frac{m}{\sin\theta} P_n^m(\cos\theta) \sin(m\varphi) \hat{\varphi} & p = e \\ -\frac{1}{\kappa r} \frac{\partial}{\partial r} [r j_n(\kappa r)] \frac{m}{\sin\theta} P_n^m(\cos\theta) \cos(m\varphi) \hat{\varphi} & p = o \end{cases} . \end{aligned} \quad (3.22)$$

Cabe señalar que los componentes $\hat{\theta}$ y $\hat{\varphi}$ de estas funciones tienen la función radial, ya sea:

$$j_n(\kappa r) \quad o \quad \frac{1}{\kappa r} \frac{\partial}{\partial r} [r j_n(\kappa r)] , \quad (3.23)$$

como su constituyente. Por consiguiente, es posible deducir que el tipo de característica en (3.23) tiene una relación importante con las condiciones de contorno que debe satisfacer un campo electromagnético en la superficie de una esfera. Por otra parte, los dos conjuntos de funciones de onda vectoriales esféricas definidos en (3.21) y (3.22) tienen la siguiente relación de ortogonalidad:

$$\iiint \vec{M}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) \cdot \vec{N}_{p'm'n'}(\vec{r}; \kappa') dV = 0 \quad (3.24)$$

$$\iiint \vec{M}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) \cdot \vec{M}_{p'm'n'}(\vec{r}; \kappa') dV = \begin{cases} 0, & m \neq m', n \neq n' \\ \frac{(1+\delta_0)\pi^2 n(n+1)(n+m)!}{\kappa^2 (2n+1)(n-m)!} \delta(\kappa - \kappa') & m = m', n = n' \end{cases} \quad (3.25)$$

$$\iiint \vec{N}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) \cdot \vec{N}_{p'm'n'}(\vec{r}; \kappa') dV = \begin{cases} 0, & m \neq m', n \neq n' \\ \frac{(1+\delta_0)\pi^2 n(n+1)(n+m)!}{\kappa^2 (2n+1)(n-m)!} \delta(\kappa - \kappa') & m = m', n = n' \end{cases} \quad (3.26)$$

$$\text{con } \delta_0 = \begin{cases} 1, & m = 0 \\ 0, & m \neq 0 \end{cases}$$

y donde se entiende que el dominio de integración es a través de todo el espacio. La demostración de estas relaciones de $m \neq m'$ y $n \neq n'$ es relativamente sencilla debido a las propiedades ortogonales de las funciones trigonométricas y de las funciones de Legendre asociadas.

Consecuentemente, conociendo las funciones de onda vectoriales adecuadas que se utilizarán y sus propiedades de ortogonalidad, podemos encontrar la expansión de la función propia de la función de Green diádica en el espacio libre mediante el método de Ohm-Rayleigh, terminología introducida en la referencia [28]. En dicho método, consideraremos dos conjuntos discretos de valores propios, m y n , y un conjunto de valores propios continuos κ , de donde se obtiene:

$$\nabla \times \left[\overleftrightarrow{I} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \right] = \int_0^\infty d\kappa \sum_{m,n} \left[\vec{N}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) \vec{A}_{pmn}(\vec{r}'; \kappa) + \vec{M}_{pmn}(\vec{r}; \kappa) \vec{B}_{pmn}(\vec{r}'; \kappa) \right], \quad (3.27)$$

donde n comienza en la unidad y m comienza desde cero, ya que para el caso $n = 0$ y $m = 0$ las funciones \vec{M} y \vec{N} son nulas. Para calcular las funciones $\vec{A}_{pmn}(\vec{r}; \kappa)$ y $\vec{B}_{pmn}(\vec{r}; \kappa)$, podemos aplicar el producto anterior de la ecuación (3.27) con respecto a $\vec{M}_{pmn}(\vec{r}; \kappa)$ y $\vec{N}_{pmn}(\vec{r}; \kappa)$ e integrar las ecuaciones resultantes en todo el espacio. De esta manera, explotando las propiedades de ortogonalidad dadas en (3.24), (3.25) y (3.26), se obtiene:

$$\vec{A}_{pmn}(\vec{r}'; \kappa) = \frac{C_{mn}}{2\pi^2} \kappa^2 \nabla' \times \vec{N}_{pmn}(\vec{r}'; \kappa) = \frac{C_{mn}}{2\pi^2} \kappa^3 \vec{M}_{pmn}(\vec{r}'; \kappa) \quad (3.28)$$

$$\vec{B}_{pmn}(\vec{r}'; \kappa) = \frac{C_{mn}}{2\pi^2} \kappa^2 \nabla' \times \vec{M}_{pmn}(\vec{r}'; \kappa) = \frac{C_{mn}}{2\pi^2} \kappa^3 \vec{N}_{pmn}(\vec{r}'; \kappa), \quad (3.29)$$

$$(3.30)$$

donde los coeficientes C_{mn} están dados por:

$$C_{mn} = (2 - \delta_0) \frac{2n + 1}{n(n + 1)} \frac{(n - m)!}{(n + m)!} \quad (3.31)$$

con el símbolo de primado haciendo referencia a derivar con respecto a (r', θ', ϕ') , es decir, con respecto a la posición \vec{r}' que denota la localización de las fuentes. Más aún, con los resultados obtenidos, la ecuación (3.27) se convierte en:

$$\nabla \times \left[\overleftrightarrow{I} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \right] = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty d\kappa \sum_{m,n} C_{mn} \kappa^3 \left[\vec{N}(\vec{r}; \kappa) \vec{M}(\vec{r}'; \kappa) + \vec{M}(\vec{r}; \kappa) \vec{N}(\vec{r}'; \kappa) \right]. \quad (3.32)$$

En estas últimas expresiones se ha utilizado una notación condensada para las funciones de onda vectoriales para simplificar la escritura eliminando el subíndice pmn .

Por otra parte, podemos usar el resultado anterior en la aplicación del método de expansión en funciones para la resolución de la función de Green magnética en el espacio libre. Para esto se utiliza el resultado en (3.32) para escribir una expansión parecida a la propuesta en (2.82). Así, la expresión obtenida, se sustituyen dentro de la ecuación (2.139), de donde se tiene:

$$\overleftrightarrow{G}_{m,k} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty d\kappa \sum_{m,n} \frac{C_{mn} \kappa^3}{\kappa^2 - k^2} \left[\vec{N}(\vec{r}; \kappa) \vec{M}(\vec{r}'; \kappa) + \vec{M}(\vec{r}; \kappa) \vec{N}(\vec{r}'; \kappa) \right].$$

Escribiendo los términos diádicos, como por ejemplos el término $\vec{N}(\vec{r}; \kappa) \vec{M}(\vec{r}'; \kappa)$, en forma de

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

una diada evaluada en la funciones de Bessel, por ejemplo:

$$\vec{N}(\vec{r}; \kappa) \vec{M}(\vec{r}'; \kappa) = \overleftrightarrow{T}_\kappa [j_n(\kappa r) j_n(\kappa r')]$$

se puede encontrar que:

$$\int_0^\infty \frac{\kappa^3}{\kappa^2 - k^2} \overleftrightarrow{T}_\kappa [j_n(\kappa r) j_n(\kappa r')] d\kappa = \frac{i\pi k^2}{2} \begin{cases} \vec{N}^{(1)}(\vec{r}; k) \vec{M}(\vec{r}'; k) & r' < r \\ \vec{N}(\vec{r}; k) \vec{M}^{(1)}(\vec{r}'; k) & r < r', \end{cases}$$

donde el superíndice (1) de las funciones $\vec{N}^{(1)}(\vec{r}; k)$ y $\vec{M}^{(1)}(\vec{r}'; k)$ denotan que la función está definida con respecto a la función de Hankel esférica de primer tipo, por ejemplo:

$$\vec{N}^{(1)}(\vec{r}; k) = \vec{N}_{pmn}^{(1)}(\vec{r}; k) = \frac{1}{k} \nabla \times \nabla \times \begin{bmatrix} h_n^{(1)}(kr) P_n^m(\cos \theta) \cos(m\varphi) \\ \sin(m\varphi) \end{bmatrix} \vec{r}$$

y de manera análoga para $\vec{M}^{(1)}(\vec{r}; k)$. Consecuentemente, de manera similar para el término $\vec{M}(\vec{r}; k) \vec{N}(\vec{r}'; k)$, la expansión de la función diádica $\overleftrightarrow{G}_{m,k}$ se reduce a:

$$\overleftrightarrow{G}_{m,k} = \frac{ik^2}{4\pi} \sum_{m,n} C_{mn} \begin{cases} \vec{N}^{(1)}(\vec{r}; k) \vec{M}(\vec{r}'; k) + \vec{M}^{(1)}(\vec{r}; k) \vec{N}(\vec{r}'; k) & r' < r \\ \vec{N}(\vec{r}; k) \vec{M}^{(1)}(\vec{r}'; k) + \vec{N}^{(1)}(\vec{r}; k) \vec{M}(\vec{r}'; k) & r < r', \end{cases} \quad (3.33)$$

donde es explícito que la función es discontinua en $r = r'$. Realizando un procedimiento análogo se obtiene que la expansión de la función diádica $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$ está dada por:

$$\overleftrightarrow{G}_{e;k} = -\frac{1}{k^2} \hat{r} \hat{r} \delta(\vec{r} - \vec{r}') + \frac{ik^2}{4\pi} \sum_{m,n} C_{mn} \begin{cases} \vec{M}^{(1)}(\vec{r}; k) \vec{M}(\vec{r}'; k) + \vec{N}^{(1)}(\vec{r}; k) \vec{N}(\vec{r}'; k) & r' < r \\ \vec{M}(\vec{r}; k) \vec{M}^{(1)}(\vec{r}'; k) + \vec{N}(\vec{r}; k) \vec{N}^{(1)}(\vec{r}'; k) & r < r'. \end{cases} \quad (3.34)$$

La expresión de la función diádica en el espacio libre de tipo eléctrico $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$ es usada para construir otro tipo de funciones de Green para cuerpos con geometría esférica. De manera particular, usaremos este resultado para resolver los campos electromagnéticos esparcidos por una esfera, modelo que coincidirá con el usado en la Solución de Mie.

3.2.2.3. Difracción de una onda plana por una esfera

Un fenómeno interesante que estamos listos para abordar, gracias al formalismo expuesto en las secciones anteriores, corresponde a que es lo que sucede cuando una onda periódica incide sobre un cuerpo material. En general, esta interacción da lugar a una oscilación forzada de cargas libres y ligadas sincrónicas con el campo aplicado. Estos movimientos restringidos de carga establecen, a su vez, un campo secundario tanto dentro como fuera del cuerpo. El campo resultante en cualquier punto es entonces la suma vectorial de los campos primario y secundario. Para asegurar el cumplimiento de las condiciones de contorno en todo momento, se debe agregar un término transitorio, construido a partir de los modos naturales con amplitudes adecuadas. Tales oscilaciones transitorias, sin embargo, son amortiguadas rápidamente por las pérdidas por absorción y radiación, dejando solo el término sincrónico de estado estacionario.

El problema más simple de esta clase y al mismo tiempo de gran interés práctico es el de una onda plana que incide sobre una esfera de radio constante y propiedades ópticas caracterizadas por $k_1 = \omega \sqrt{\epsilon_1 \mu_1}$, incrustada en un medio homogéneo e infinito con propiedades ópticas $k_2 = \omega \sqrt{\epsilon_2 \mu_2}$.

En este tipo de interacción luz con la materia se puede calcular la cantidad y distribución angular de la luz esparcida por la partícula, así como la cantidad absorbida; además, es fácil descubrir que estas cantidades depende en forma detallada de la naturaleza de la partícula, es decir, de su forma, tamaño y los materiales que lo componen. Esta fuerte dependencia en las características, en especial de la dependencia en la geometría de la partícula, delimitan las soluciones analíticas a las que tenemos acceso con base en el formalismo físico-matemático. Tal es así, que las soluciones conocidas se restringen a problemas con simetrías rectangulares, cilíndricas o esféricas.

Con base en el formalismo presentado en las secciones anteriores, en esta sección estudiaremos la luz esparcida por una partícula con geometría esférica. Suponiendo dichas características, podremos usar la ecuación integral de volumen obtenido en la sección 3.2.1, además, gracias a la suposición de simetría esférica podremos usar las expansiones de la función de Green en coordenadas esféricas para la implementación de las condiciones de frontera adecuadas. Para este último punto podemos retomar la clasificación de las funciones de Green diádicas introducidas en la sección 2.5.3. Especialmente, para una esfera de radio “ a ” y con centro localizado en el origen, es necesario construir la función de Green de primer tipo asociada al problema con simetría esférica. Para esto, aplicaremos el método de superposición de esparcimiento, que en general se aplica para obtener la forma explícita de la función de Green ($\overleftrightarrow{G}_{e,(n)}$, $n = 1, 2$) en términos del caso en espacio libre ($\overleftrightarrow{G}_{e;k}$). Con base en dicho método, la función de Green de tercer tipo $\overleftrightarrow{G}_e^{11}$ y $\overleftrightarrow{G}^{21}$ estará dado por:

$$\begin{aligned}\overleftrightarrow{G}_e^{(11)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \overleftrightarrow{G}_{e;k_1}(\vec{r}, \vec{r}') + \overleftrightarrow{G}_{es}^{(11)}(\vec{r}, \vec{r}') \quad R \leq a, \\ \overleftrightarrow{G}_e^{(21)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \overleftrightarrow{G}_{es}^{(21)}(\vec{r}, \vec{r}') \quad R \geq a,\end{aligned}\tag{3.35}$$

donde $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$ estará dada por (3.34); y las funciones de Green de tercer tipo elegidas corresponden al caso de esfera dieléctrica o parcialmente conductora, de tal manera que:

$$\begin{aligned}k_1 &= \omega\sqrt{\mu_1\epsilon_1} \quad (\text{región 1, } r \geq a) \\ k_2 &= \omega\sqrt{\mu_2\epsilon_2} \quad (\text{región 2, } r \leq a),\end{aligned}$$

donde k_1 representa el medio en el que está embebida la esfera y k_2 representa a la esfera. Por ejemplo, para una esfera dieléctrica embebida en aire: $\epsilon_1 = \epsilon_0$, $\epsilon_2 = \epsilon$, $\mu_1 = \mu_2 = \mu_0$.

Por otra parte, en vista de la composición de la función $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$ el término que representa la parte de esparcimiento debe poseer un estructura similar, a saber:

$$\overleftrightarrow{G}_{es}^{(11)}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{ik_1}{4\pi} \sum_{m,n} C_{mn} \left[A_n \vec{M}^{(1)}(\vec{r}; k_1) \vec{M}^{(1)}(\vec{r}'; k_1) + B_n \vec{N}^{(1)}(\vec{r}; k_1) \vec{N}^{(1)}(\vec{r}'; k_1) \right],\tag{3.36}$$

$$\overleftrightarrow{G}_{es}^{(21)}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{ik_2}{4\pi} \sum_{m,n} C_{mn} \left[C_n \vec{M}^{(1)}(\vec{r}; k_2) \vec{M}^{(1)}(\vec{r}'; k_1) + D_n \vec{N}^{(1)}(\vec{r}; k_2) \vec{N}^{(1)}(\vec{r}'; k_1) \right],\tag{3.37}$$

donde se han usan las funciones con subíndice (1) para restringir la contribución de la dispersión a un comportamiento divergente, como es de esperar, y que se hereda del comportamiento asintótico

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

de las funciones esféricas de Hankel $h_n^{(1)}$ (sección 2.4.0.2). Por otra parte, los coeficientes A_n , B_n , C_n y D_n se pueden determinar aplicando condiciones de frontera en (2.156) y (2.157), las cuales para el caso aplicado a la superficie de la esfera propuesta está dada por:

$$\left. \begin{aligned} \hat{r} \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e^{(11)} &= \hat{r} \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e^{(21)} \\ \frac{1}{\mu_1} \hat{r} \times \nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e^{(11)} &= \frac{1}{\mu_2} \hat{r} \times \nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}_e^{(21)} \end{aligned} \right\}, R = a,$$

de esta manera se obtiene:

$$\begin{aligned} j_n(\rho_1) + A_n h_n^{(1)}(\rho_1) &= C_n j_n(\rho_2) & \frac{k_1}{\mu_1} \left\{ \frac{[\rho_1 j_n(\rho_1)]'}{\rho_1} + A_n \frac{[\rho_1 h_n^{(1)}(\rho_1)]'}{\rho_1} \right\} &= \frac{k_2}{\mu_2} \left\{ C_n \frac{[\rho_2 j_n(\rho_2)]'}{\rho_2} \right\} \\ \frac{\rho_1 j_n(\rho_1)'}{\rho_1} + B_n \frac{[\rho_1 h_n^{(1)}(\rho_1)]'}{\rho_1} &= D_n \frac{\rho_2 j_n(\rho_2)'}{\rho_2} & \frac{k_1}{\mu_1} [j_n(\rho_1) + B_n h_n^{(1)}(\rho_1)] &= D_n \left(\frac{k_2}{\mu_2} \right) j_n(\rho_2) \end{aligned}$$

donde: $\rho_1 = k_1 a$, $\rho_2 = k_2 a$.

y el símbolo ' denota la derivada de la función. De esta manera, resolviendo los coeficientes para el campo la función de Green externa se obtiene:

$$A_n = - \frac{\mu_1 j_n(m x) [x j_n(x)]' - \mu_2 j_n(x) [m x j_n(m x)]'}{\mu_1 j_n(m x) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_2 h_n^{(1)}(x) [m x j_n(m x)]'} \quad (3.38)$$

$$B_n = - \frac{\mu_1 j_n(m x) [m x j_n(m x)]' - \mu_2 m^2 j_n(m x) [x j_n(x)]'}{\mu_1 h_n^{(1)}(x) [m x j_n(m x)]' - \mu_2 m^2 j_n(m x) [x h_n^{(1)}(x)]'} \quad (3.39)$$

$$\text{con } m = \frac{k_1}{k_2}, \quad x = a k_2$$

Con base en las condiciones anterior, podemos derivar la solución de Mie, para la difracción de una onda plana por una esfera [29], de la solución asintótica del problema del dipolo horizontal [30], el cual se ilustra en la Figura 3.5, donde se muestra con detalle la geometría del problema bajo consideración. Para un dipolo eléctrico horizontal con momento de corriente c apuntando en la

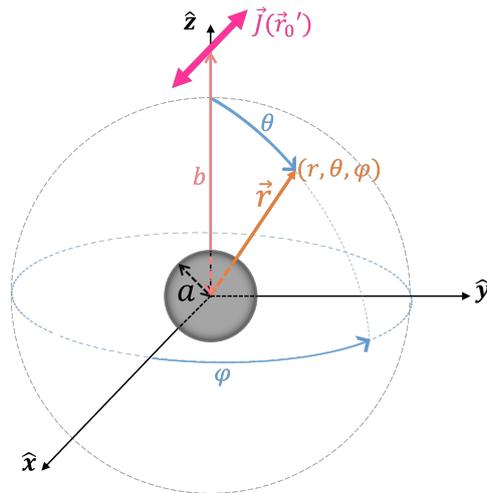


Figura 3.5: Ilustración del sistema resuelto en la solución de Mie, en el cual se estudia la interacción entre un dipolo y una esfera parcialmente conductora

dirección \hat{x} y localizado en $r' = b$, $\theta' = 0$, $\phi' = 0$, se tiene:

$$\vec{J}_{ext}(\vec{r}') = c \frac{\delta(r' - b) \delta(\theta' - 0) \delta(\phi' - 0)}{b^2 \sin \theta'} \hat{x}.$$

El campo eléctrico producido por ese dipolo en presencia de una esfera parcialmente conductora con radio igual a “ a ” está dado por:

$$\vec{E}_1(\vec{r}) = i\omega\mu \iiint \overleftarrow{G}_e^{(11)}(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \vec{J}_{ext}(\vec{r}') dV' = i\omega\mu \overleftarrow{G}_e^{(11)}(\vec{r}, \vec{r}'_0) \cdot \hat{x}, \quad \vec{r}'_0 = (b, 0, 0) \quad (3.40)$$

Usando la expresión de $\overleftarrow{G}_e^{(11)}$, conformada por (3.35) y (3.36) se obtiene:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{-k_1\omega\mu_1 c}{4\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left\{ \begin{array}{l} \left[j_n(\rho_b) + A_n h_n^{(1)}(\rho_b) \right] \vec{M}^{(1)}(k_1) + \frac{1}{\rho_b} \left([\rho_b j_n(\rho_b)]' + B_n [\rho_b h_n^{(1)}(\rho_b)]' \right) \vec{N}^{(1)}(k_1) \\ h_n^{(1)}(\rho_b) \left[\vec{M}(k_1) + A_n \vec{M}^{(1)}(k_1) \right] + \frac{[\rho_b j_n(\rho_b)]'}{\rho_b} \left[\vec{N}(k_1) + B_n \vec{N}^{(1)}(k_1) \right]' \end{array} \right\}_{\substack{\rho > b \\ \rho < b}}, \quad (3.41)$$

donde $\rho_b = k_1 b$. Ahora bien, para derivar la serie obtenida en la solución de Mie para la difracción de una onda plana por una esfera, usamos la solución (3.41) para el caso en el que el dipolo está lejos de la esfera. Con base en esto podemos suponer que kb es muy grande y, por lo tanto, podemos aproximar la función de Hankel esférica en términos de su comportamiento asintótico. De esta manera, con base en los resultados de la tabla 2.5, consideramos que:

$$h_n^{(1)}(kb) \sim (-i)^{n+1} \frac{e^{ikb}}{kb}$$

$$\frac{[kb h_n^{(1)}(kb)]'}{kb} \sim (-i)^n \frac{e^{ikb}}{kb}.$$

Sustituyendo estos valores en (3.41) para el caso $r < b$ e identificando la amplitud de la onda plana dada por:

$$E_0 = \frac{i\omega\mu c e^{ikb}}{kb} \quad (kb \gg 1),$$

se obtiene:

$$\vec{E}(\vec{r}) = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left\{ \left[\vec{M}_{o1n}(\vec{r}; k_1) + i \vec{N}_{e1n}(\vec{r}; k_1) \right] + \left[A_n \vec{M}_{o1n}^{(1)}(\vec{r}; k_1) - i B_n \vec{N}_{e1n}^{(1)}(\vec{r}; k_1) \right] \right\}, \quad (3.42)$$

donde identificamos el primer término de las llaves como la contribución al campo debido a la fuente externa y el segundo término como el campo esparcido por la esfera. Ahora bien, en física a los términos \vec{M}_n y \vec{N}_n se les conoce con el nombre de modos normales electromagnéticos de la partícula esférica. Para dar una interpretación física, Mie representó las líneas del campo eléctrico correspondientes a las componentes transversales de los primeros cuatro modos normales,

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

los cuales se muestran en la Figura 3.6 y corresponden a la reproducción presentada por Bohren en la referencia [31], y al cual le hemos realizado unos pequeños ajustes para coincidir con la notación propuesta en este trabajo. Como se menciona en dicha referencia, las líneas de campo se muestran en la superficie de una esfera imaginaria concéntrica con la partícula y de mayor tamaño que esta.

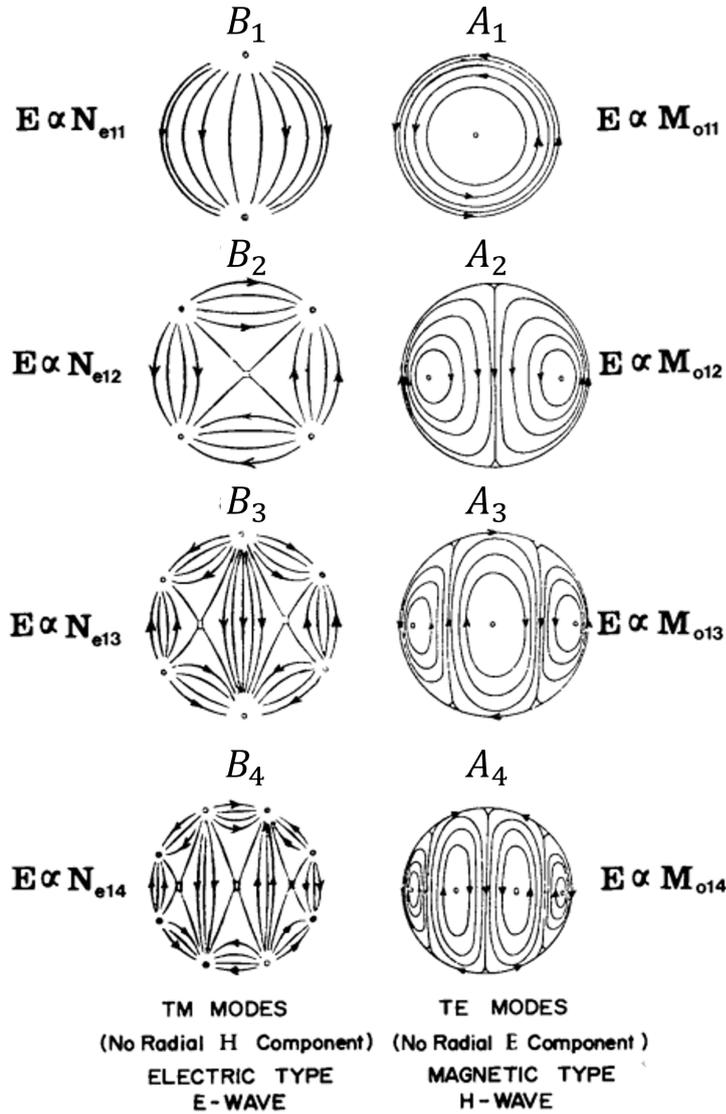


Figura 3.6: Patrones del campo eléctrico: modos normales (extraídos de [31]).

Para cada n existen dos tipos de modos: uno para el que *no existe componente de campo magnético radial*, denominado **modos magnéticos transversales**, y otro para el que *no existe componente de campo eléctrico radial*, denominado **modos eléctricos transversales**. Esta clasificación de modos puede ser confusa, sin embargo, es común encontrarla en la literatura, por lo que hemos considerado importante abordar dicha terminología con los diagramas de Mie, como comúnmente se hace.

Observando con atención la forma de las líneas, es posible notar que hay puntos donde las líneas del campo parecen converger o divergen y este comportamiento resultar confuso ya que nos induce a pensar que existen cargas libres fuera de la partícula. Claramente este comportamiento no debe ser relacionado con la existencia de cargas libre ya que las líneas de campo están representadas en una esfera imaginaria que rodea a la partícula, es decir, están descrita en las regiones de espacio libre. En consecuencia, es necesario aclarar que estos puntos de carga aparente son posiciones en la esfera imaginaria en las que el campo transversal se desvanece y los campos radiales no se pueden representar en una superficie esférica. Para ejemplificar y dilucidar este hecho, Bohren propone analizar de manera partícula la componente radial del campo para el modo B_1 , el cual corresponde al dipolo eléctrico oscilante. En la Figura 3.7 se muestran las líneas de campo en el plano xy correspondientes al término $-i\vec{N}_{e11}^{(1)}$. Como se puede observar, para una distancia r dada, la componente φ del campo se desvanece a medida que nos acercamos al eje x ; a lo largo de este eje el campo es completamente radial. Esta es, por tanto, la razón por la que las líneas de campo del diagrama a1 de la Figura 3.6 desaparecen cerca de los polos. Efectos similares ocurren en cada uno de los diagramas más complicados de la misma Figura.



Figura 3.7: Campo del dipolo radiante

3.3. Aproximación dipolar.

La respuesta óptica de un sistema periódico compuesto por partículas de unas cuantas decenas de nanómetros y con distancia entre partícula de varias veces su dimensión, en una primera aproximación, se puede calcular mediante la aproximación de dipolos acoplados (CDA). Tal enfoque se aborda explotando la propiedad de simetría de traslación del sistema. En principio, el número, la forma y el tamaño de la celda pueden elegirse libremente, siempre que las dimensiones generales sean pequeñas en comparación con la longitud de onda de la luz. Además, es necesario suponer que las celdas no pueden intercambiar carga durante su interacción con la onda electromagnética incidente, requisito que se puede derivar de un comportamiento dieléctrico de la estructura cristalina, o bien de un comportamiento metálico restringido a energías suficientemente altas ($\hbar\omega > 1 \text{ eV}$). Bajo dichas suposiciones, la dispersión de una onda plana de luz externa en un arreglo periódico de partículas idénticas, que son pequeñas en comparación con la longitud de onda y su separación, puede ser descrita dentro de la respuesta lineal de cada una de las partículas que componen al sistema completo. En términos de este enfoque, el método de dipolo acoplados consiste en aproximar la respuesta de los dispersores simples en términos de una polarizabilidad de dipolo puntual.

3.3.1. Tensor de polarizabilidad pura.

El primer y más básico ingrediente de la funcionalidad de la metasuperficie es la polarizabilidad óptica “pura” de la partícula individual (aislada), es decir, la función de respuesta lineal que cuantifica los momentos dipolares y multipolares inducidos localmente en respuesta a los campos eléctricos y magnéticos incidentes.

Consecuentemente, para considerar un sistema periódico bajo la aproximación dipolar, los elementos del sistema se deberán modelar como dispersores puntuales magnetoeléctricos, los cuales quedan descritos en términos de un tensor de polarizabilidad. Por definición, la polarizabilidad relaciona el momento dipolar eléctrico y magnético inducido, \vec{p} y \vec{m} , en respuesta a un campo eléctrico \vec{E} y \vec{M} de acuerdo con:

$$\begin{bmatrix} \vec{p} \\ \vec{m} \end{bmatrix} = \overleftrightarrow{\alpha} \begin{bmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{bmatrix}, \quad (3.43)$$

Cabe remarcar que para que la relación (3.43) sea consistente, es conveniente escribir a la polarizabilidad magneto-eléctrica $\overleftrightarrow{\alpha}$ de la forma:

$$\overleftrightarrow{\alpha} = \begin{pmatrix} \overleftrightarrow{\alpha}_{EE} & \overleftrightarrow{\alpha}_{EH} \\ \overleftrightarrow{\alpha}_{HE} & \overleftrightarrow{\alpha}_{HH} \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

donde $\overleftrightarrow{\alpha}_{EE}$ denota al tensor de polarizabilidad eléctrica de dimensión 3×3 , el cual cuantifica el momento dipolar eléctrico inducido en respuesta a un campo eléctrico. Similarmente, $\overleftrightarrow{\alpha}_{HH}$ denota al tensor de polarizabilidad magnética de dimensión 3×3 , el cual cuantifica el momento dipolar magnético inducido en respuesta a un campo magnético. Finalmente, $\overleftrightarrow{\alpha}_{EH}$ denota el acoplamiento magneto-eléctrico que describe el momento dipolar eléctrico inducido en respuesta a un campo magnético y viceversa. En este primer caso, se enfatiza que el tensor de polarización $\overleftrightarrow{\alpha}$ denotara la polarizabilidad “pura (aislada)”, es decir, $\overleftrightarrow{\alpha}$ describe los momentos dipolares inducidos en ausencia de dispersores puntuales vecinos cercanos.

En particular, la plasmónica se ha centrado principalmente en la ingeniería de la parte eléctrica de la polarizabilidad, utilizando el tamaño, la forma y la composición del material del dispersor para diseñar la dependencia espectral de las resonancias locales por medio de las resonancias de Mie y plasmón de superficie local (LSP)), así como la intensidad y la anisotropía de los campos electromagnéticos esparcidos por medio de la magnitud y forma $\overleftrightarrow{\alpha}$. Además, cabe remarcar que al agregar la polarizabilidad magnética se tiene acceso a muchos fenómenos de interés actual en nanoóptica, ya que el sistema dependerá de la respuestas magnéticas y magnéticas eléctricas acopladas [32].

En el caso particular de este trabajo, nos concentraremos en estudiar únicamente la respuesta eléctrica del sistema, ya que supondremos que el acoplamiento magnético-eléctrico es mínimo. Para esto se modeló la dependencia de los dispersores locales en términos de las resonancias de Mie, así, la descripción analítica de la polarizabilidad de partículas esféricas son caracterizadas en términos de su función dieléctrica. Con base en esto, para modelar la polarizabilidad, retomaremos los resultado de la sección 3.2.2.3. Notando particularmente que la primera contribución al campo dispersado en la solución de Mie es:

$$\vec{E}(\vec{r}) \sim -iB_1 \vec{N}_{e1n}^{(1)}(\vec{r}; k_1),$$

donde se a elegido a la función $\vec{N}_{e1n}^{(1)}$ por denominación como dipolo eléctrico oscilante; se proponer modelar al tensor de polarizabilidad electrostática $\overleftrightarrow{\alpha}_E$ de la forma:

$$\overleftrightarrow{\alpha}_E = \alpha_E \overleftrightarrow{I}_{3 \times 3} \quad (3.45)$$

$$\alpha_E = \frac{3i}{2k_1^3} \frac{m^2 j_1(mx) [x j_1(x)]' - j_1(x) [mx j_1(mx)]'}{m^2 j_1(mx) [x h_1^{(1)}(x)]' - h_1^{(1)}(x) [mx j_1(mx)]'}, \quad (3.46)$$

con

$$x = k_1 a = \frac{2\pi\sqrt{\epsilon_1}}{\lambda} a \quad ; \quad m = \frac{\sqrt{\epsilon_1}}{\sqrt{\epsilon_2}}, \quad (3.47)$$

con base en la definición de la sección 3.2.2.3. Es importante remarcar que la expresión (3.46) modela el campo radiado al considerar la perdida de energía, como se discute a detalle en la referencia [33]. Por otra parte, dado que la expresión (3.46) modela las propiedades ópticas del sistema en términos de la función dieléctrica de la partícula ϵ_2 y de la función dieléctrica de la matriz ϵ_1 , por lo que, en este punto del análisis es conveniente abordar con mayor detalle la construcción de estas. Además, con base en el formalismo usado en el desarrollo de la solución de Mie, es necesario remarcar que se requiere que la función dieléctrica de la matriz sea real, es decir, $\epsilon_1 \in \mathbb{R}$. Por consiguiente, las propiedades ópticas con mayor física, del sistema abordado, se concentra en la construcción de la función dieléctrica de la partícula, es decir, de $\epsilon_2 = \epsilon$, cuya construcción se aborda con mayor detalle en la siguiente sección.

3.3.2. Modelo de Drude - Función dieléctrica modificada

En general, la expresión analítica de la función dieléctrica se modela con base en suposiciones físicas del material y de parámetros libres que se ajustan mediante mediciones experimentales. No obstante, debido a la complejidad experimental la mayoría de las mediciones se realizan sobre materiales en bulto, es decir, de tal manera que las dimensiones del material son mucho mayores que el camino libre medio de los electrones l , el cual cuantifica la distancia promedio que recorre un electrón dentro del material antes de colisionar. Sin embargo, la condición de material en bulto no necesariamente es cierto a la nanoescala, pues el camino libre medio de los electrones en metales usualmente es de decenas de nanómetros y esto implica la existencia de una fuente de amortiguamiento extra al colisionar los electrones contra la superficie del material, y no sólo entre ellos. Debido a este detalle es necesario incluir una corrección por tamaño para el caso de sistemas a la nanoescala.

En particular, en el presente trabajo nos concentramos en modelar la función dieléctrica para el caso de materiales parcialmente conductores, ya que es común que los cristales plasmónicos estén compuestos de partículas con estas propiedades. En este contexto, el parámetro l se le relaciona con la constante de amortiguamiento γ (del modelo de Drude) a través de la expresión $l = v_F/\gamma$, donde v_F es la velocidad de Fermi [34] de los electrones de conducción. Posteriormente, es necesario considerar la llamada corrección de tamaño finito, con la cual se pretende corregir las funciones dieléctricas obtenidas de manera experimental, para tomar en cuenta el amortiguamiento extra por el tamaño de las partículas.

Para empezar, existen dos contribuciones principales para la función dieléctrica de un material, aquellas provenientes de transiciones electrónicas dentro de la banda de conducción, llamadas intrabanda, y aquellas que se dan cuando un electrón trasciende de una banda a otra, llamadas interbanda. En algunos materiales, las transiciones intrabanda son las más importantes, ya que en

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

estos materiales las bandas con menor energía que la banda de conducción están completamente llenas, mientras que la de conducción está parcialmente llena. Sin embargo, en algunos metales tales como la plata y el oro, los dos tipos de transiciones son importantes [34], pues la banda de conducción se traslapa con bandas vacías de menor energía, tal como se puede ver en la Figura 3.8.

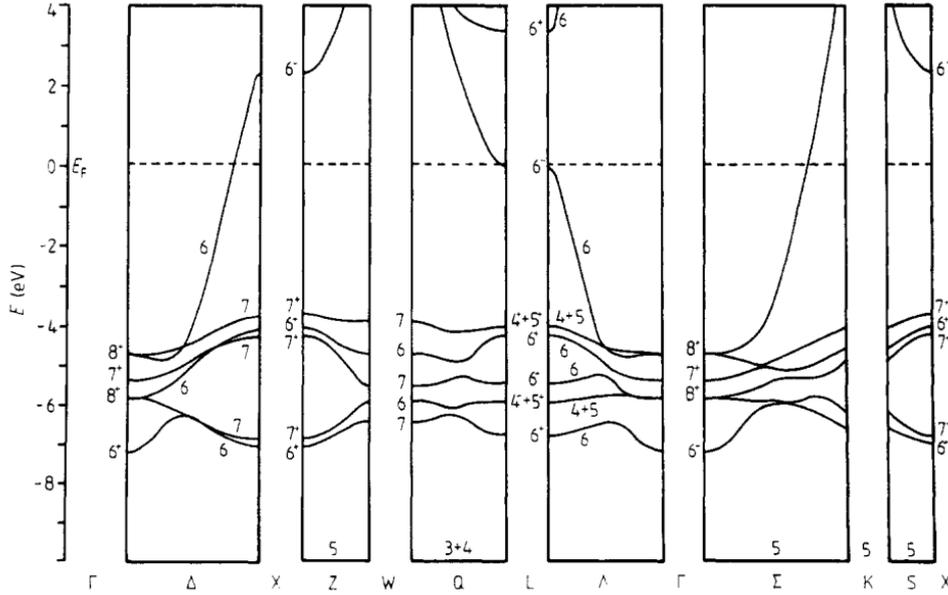


Figura 3.8: Estructura de bandas de la plata, obtenida de la referencia [35]. Las divisiones verticales corresponden a los límites de los puntos de alta simetría en la celda unitaria

En teoría, las transiciones intrabanda son representadas por el modelo de Drude, pues este sólo toma en cuenta electrones libres, es decir, electrones que se encuentran en la banda de conducción. Estos electrones son los causantes del amortiguamiento extra debido al tamaño finito, pues al estar prácticamente libres en todo el volumen del material, son los que colisionan contra su superficie. Por esta razón, la corrección de tamaño finito debe hacerse sobre la contribución intrabanda y, si ésta es modelada por el modelo de Drude, el parámetro de amortiguamiento γ debe ser modificado, aumentándolo para tomar en cuenta estas colisiones. Con el fin de esto se proponer $\gamma \leftarrow \gamma + \gamma'(L_{eff})$, donde $\gamma'(L_{eff})$ depende del parámetro L_{eff} , el cual está relacionado con el tamaño y la geometría de la partícula. Por consiguiente, considerando una función dieléctrica experimental, cuyas contribuciones son tanto interbanda como intrabanda, podemos escribir:

$$\epsilon_{exp} = \epsilon_{Drude} + \epsilon_{inter}.$$

De esta manera, si se quiere obtener la función dieléctrica corregida, que denotaremos por ϵ_{corr} , es necesario calcular la diferencia entre la función dieléctrica experimental (material en bulto) y el modelo de Drude con el parámetro γ usual (transiciones intrabanda), para posteriormente sumar el resultado con el modelo de Drude modificando (transiciones interbanda), explícitamente:

$$\begin{aligned} \epsilon_{corr} &= \epsilon_{exp} - \epsilon_{Drude} + \epsilon_{Drude}^{mod} \\ &= \epsilon_{exp}(\omega) + \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} - \frac{\omega_p^2}{\omega[\omega + i(\gamma + \gamma'(L_{eff}))]}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

donde ω_p representa la frecuencia de plasma del material, la cual es comúnmente definida en el desarrollo del modelo de Drude.

Ahora bien, usualmente para la corrección de tamaño se utiliza la relación $\gamma'(L_{eff}) = Av_F/L_{eff}$, la cual está basado en la definición del camino libre medio l , ya que difiere únicamente en el parámetro adimensional A , el cual usualmente es considerado cercano a la unidad. En particular, dado que el parámetro A al parámetro L_{eff} comprende las propiedades geométricas de la partícula, existen varias maneras de calcularlo. Sin embargo, nosotros optamos por usar el procedimiento reportado en [36], el cual usa un enfoque de probabilidad para relacionar directamente el parámetro geométrico L_{eff} con el camino libre medio efectivo de los electrones en una geometría en particular, a saber:

$$L_{eff} = \frac{V}{S} \quad \Rightarrow \quad \gamma'(L_{eff}) = \frac{Av_F S}{4V} \quad (3.49)$$

donde V representa el volumen de la partícula, y S su área superficial. De esta relación es importante notar que entre mayor sea la partícula, mayor será el cociente entre el volumen y el área superficial, provocando así que γ' tienda a cero conforme crece la partícula. Esto es de esperarse, pues entre mayor sea la partícula, menor es necesaria la corrección por tamaño finito. Además, es importante remarcar que la corrección de la tamaño contribuye a la parte imaginaria de la función dieléctrica, la cual está relacionada con la absorción de energía por la interacción con la partícula. Así, de esto último se deduce que al disminuir el tamaño de la partícula se agrega un mecanismo extra de amortiguamiento en la interacción luz-materia.

Finalmente, como se había anticipado, la función dieléctrica corregida ϵ_{corr} es usada para la construcción de la polarización electrostática α_E de la relación (3.46). Para esto es útil definir como $\epsilon_2 = \epsilon_{corr}$ para describir las propiedades ópticas de las partículas plasmónicas; y $\epsilon_1 = \epsilon$ para describir las propiedades de los alrededores. De esta manera, se asegura la congruencia con la solución de Mie y se simplifica la notación. Consecuentemente, sustituyendo las definiciones anteriores en la relación (3.47) y, posteriormente, usando los datos obtenidos para el cálculo de (3.46), se construye la polarizabilidad pura de las partículas que componen al cristal plasmónico.

En particular, en el presente trabajo, se modelaron partículas esféricas de plata. Con base en lo anterior, partimos de los datos experimentales del índice de refracción de la plata reportados en [37], y usamos los parámetros de electrón libre para la plata reportados en [36]. De esta manera, usando la ecuación (3.48), se calculó la función dieléctrica modificada para el caso de una partícula esférica de plata con radio de 2 nm y 50 nm, respectivamente. Las gráficas de las funciones se reportan en la Figura 3.9.

En la Figura 3.9, para el caso de la partícula de 2 nm de radio, se observa que la curva correspondiente a la parte imaginaria de la función dieléctrica con corrección de tamaño finito se encuentra por encima de la función dieléctrica experimental, lo cual corrobora el mecanismo de absorción, antes mencionado, para partículas pequeñas. Además, al comparar los dos casos reportados en la figura, es posible notar que la corrección se vuelve más significativa a medida que el tamaño de la partícula disminuye. Así, por consiguiente, se enfatiza la importancia de añadir la corrección en el estudio que involucre partículas de unos cuantos nanómetros.

Por otra parte, como se mencionó antes, usando la función dieléctrica reportada en la Figura 3.9 se determinó la polarizabilidad pura de una partícula esférica de plata con radio de 50 nm. La gráfica de dicha polarizabilidad se reportan en la Figura 3.10.

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

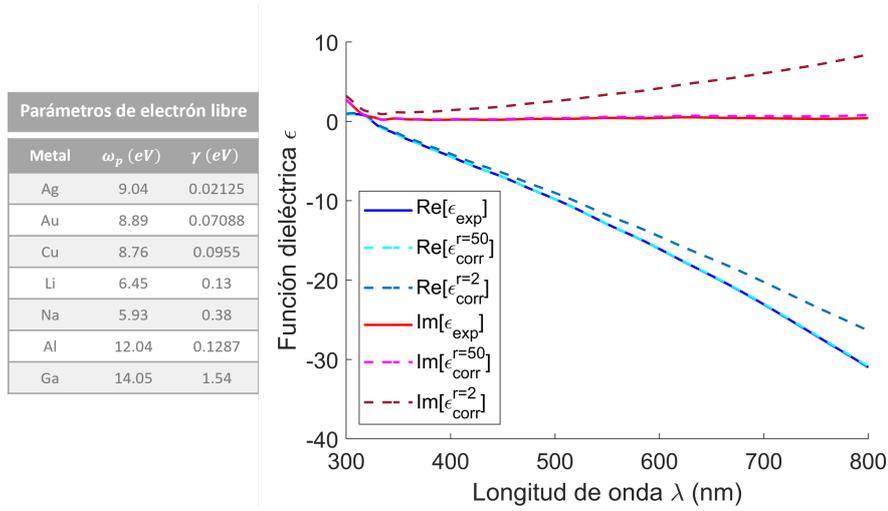


Figura 3.9: Tabla de parámetros de electrón libre extraídos de [36]. Gráfica de la parte real e imaginaria de la función dieléctrica para la plata, con base en datos experimentales y modelo teórico con corrección de tamaño. La gráfica reporta los resultados para una partícula esférica con radio de 2 nm y 50 nm, independientemente.

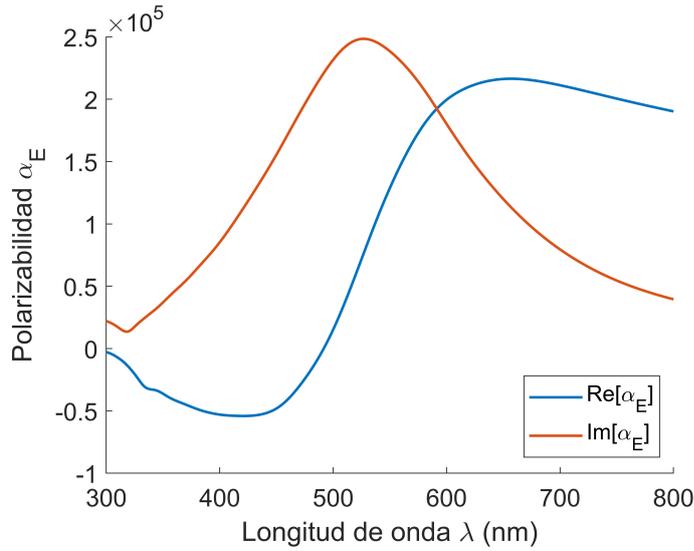


Figura 3.10: Gráfica de la parte real e imaginaria de la polarizabilidad electrostática α_E , con base en la función dieléctrica ϵ_{corr} para el caso de una partícula esférica con radio de 50 nm.

Los resultados reportados en la Figura (3.10) se usarán en este proyecto para implementar la aproximación de dipolos acoplados en el estudio de un cristal plasmónico formado por esferas de plata de 50 nm de radio. Así, para proseguir, en las siguientes secciones se introduce la aproximación de dipolos acoplados orientada al estudio de sistemas con simetría de traslación.

3.4. CDM: Momento dipolar inducido en estructuras periódicas

Para abordar el estudio de la respuesta óptica de a dispersión de una onda plana de luz externa por una estructura periódica de partículas idénticas puede ser descrita dentro de la respuesta lineal cuando las partículas de la estructura son lo suficientemente pequeñas en comparación con la longitud de onda incidente y con la separación entre ellas. Así, bajo dichas condiciones y como primera aproximación al análisis de la respuesta óptica del sistema luz-materia, se propone que los dispersores se modelen por medio de su respuesta dipolar. De esta manera, en una primera instancia, se aborda el problema analizando la contribución de segundo orden, es decir, la segunda respuesta más sencilla que puede expresar la partícula.

En este mismo contexto, se propone que la respuesta total del sistema dependa de la superposición lineal de la respuesta dipolar de las partículas al estímulo externo de la luz incidente y a la interacción con sus vecinos cercanos en el arreglo. Además, esta última respuesta al acoplamiento entre los componentes de la estructura periódica se puede abordar de manera accesible explotando la propiedad de simetría de traslación del sistema. Por consiguiente, en las siguientes secciones se introducen los conceptos con las cuales se pueden estudiar la respuesta de los sistemas periódicos.

3.4.0.1. Descripción geométrica de un sistema periódico

En términos de la propiedad de simetría de traslación del sistema, podemos caracterizar la ubicación de los dispersores en la red por medio del vector de posición

$$\vec{R}_{\mathbf{T}} = \vec{R}_{\mathbf{n}} + \vec{r}_{\nu}, \quad (\mathbf{T} = \mathbf{n}, \nu), \quad \nu = 1, 2, \dots, N. \quad (3.50)$$

Aquí \mathbf{n} es un vector cuyas entradas corresponden a números enteros que etiqueta los vectores de la red de Bravais $\vec{R}_{\mathbf{n}}$; los vectores \vec{r}_{ν} corresponden a los vectores base los cuales se encuentran dentro de la celda unitaria y están asociados con cargas eléctricas ϵ_{ν} . Asimismo, gracias a la propiedad de periodicidad, el sistema cuenta con un espacio recíproco discreto caracterizado por los vectores de red recíprocos $\vec{K}_{\mathbf{n}}$ correspondientes a los vectores $\vec{R}_{\mathbf{n}}$, de tal manera que si:

$$\vec{R}_{\mathbf{n}} = \sum_{i=1}^{d_{\Lambda}} n_i \vec{a}_i \quad \text{con } d_{\Lambda} = \text{dimensión de la red } \Lambda \quad (3.51)$$

entonces

$$\vec{K}_{\mathbf{n}} = 2\pi \sum_{i=1}^{d_{\Lambda}} n_i \vec{b}_i \quad \text{con } d_{\Lambda} = d_{\Lambda^*} = \text{dimensión de la red recíproca } \Lambda^* \quad (3.52)$$

donde

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, d_{\Lambda} \quad (3.53)$$

Cabe mencionar que si $d_{\Lambda} = 1$, el subíndice en los vectores se pierde y se tiene: $\vec{a} = a\hat{x}, \vec{b} = \vec{a}/a^2$.

De acuerdo a estas definiciones, para todos los casos se tiene que $\vec{R}_{\mathbf{n}} \cdot \vec{K}_{\mathbf{m}} = 2\pi N$ para algún entero N , lo cual implica que:

$$e^{i\vec{R}_{\mathbf{n}} \cdot \vec{K}_{\mathbf{m}}} = 1 \quad (3.54)$$

Esta es una de las propiedades que más destacan de los vectores recíprocos, ya que implica la simplificación de las expresiones en el análisis del espacio de frecuencias asociado.

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

Por otra parte, si tenemos una red Λ podemos definir una cantidad \mathcal{A} como la longitud ($d_\Lambda = 1$), el área ($d_\Lambda = 2$) o el volumen ($d_\Lambda = 3$) de la celda unitaria, la cual permite restringir el análisis del sistema a esa región. Así, en términos de los vectores de red \vec{a}_i , explícitamente se tiene:

$$\mathcal{A} = \begin{cases} |\vec{a}|, & d_\Lambda = 1, \\ |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|, & d_\Lambda = 2, \\ |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|, & d_\Lambda = 3. \end{cases} \quad (3.55)$$

Asimismo, la “longitud”, el “área” o el “volumen” (en unidades recíprocas) de la celda unitaria de la red recíproca es, en cada caso, \mathcal{A}^{-1} .

Para finalizar, con base en la notación de la red periódica, para cualquier vector \vec{q} d -dimensional puede ser escrito como:

$$\vec{q} = \vec{q}^{\parallel} + \vec{q}^{\perp}, \quad (3.56)$$

donde \vec{q}^{\parallel} esta en el espacio generado por los vectores \vec{a}_i (que es el mismo espacio generado por los vectores \vec{b}_i) y $\vec{q}^{\parallel} \cdot \vec{q}^{\perp} = 0$. De esta manera, si $d = d_\Lambda$, entonces es evidente que $\vec{q} = \vec{q}^{\parallel}$. También se especifica que, al igual que en el capítulo anterior, se describirán los vectores unitarios con un acento circunflejo, de tal manera que $\vec{q} = q \hat{q}$ con $q = |\vec{q}|$. Para ilustrar la notación usada, en la Figura 3.11 se muestra un esquema del caso $d = 3$, $d_\Lambda = 2$, de tal modo que la red representada corresponde a una red cuadrada.

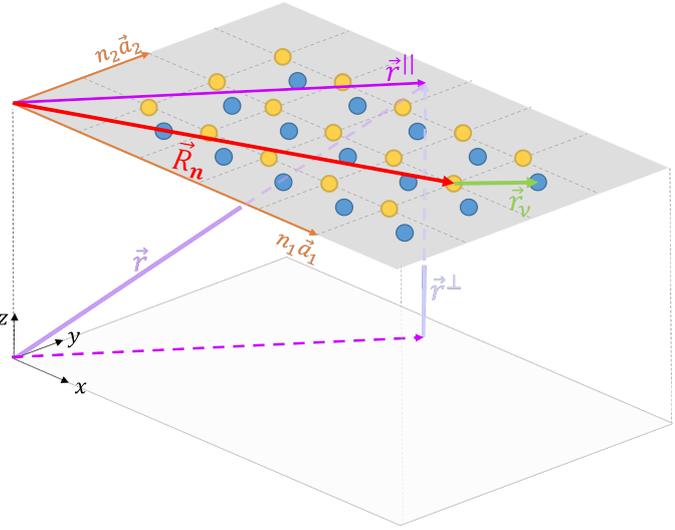


Figura 3.11: Representación de componentes y notación usada para la descripción del sistema de estudio

3.4.1. Respuesta de una partícula en la red.

La principal aproximación del método de dipolos acoplados consiste en aproximar la respuesta de los dispersores por una polarizabilidad de un dipolo puntual, de tal manera que la interacción con la onda plana de luz externa permite modelar a las partículas del cristal por medio de una distribución de corriente de la forma

$$\vec{J}_{ext}(\vec{r}) = i\omega\delta(\vec{r} - \vec{r}')\vec{p},$$

donde se remarca el hecho de que representamos la polarización de las partículas como una fuente externa, debido a que supondremos cierto control sobre ellas por medio del diseño del arreglo periódico, aprovechándose así de la ambigüedad existente entre fuentes ligadas y externas. Consecuentemente, dentro de la respuesta lineal, no magnética, se puede suponer que la partícula en la posición \vec{R}_T responde como un dipolo inducido dado por:

$$\vec{p}_T = \vec{p}_{\mathbf{n},\mu} = \overleftrightarrow{\alpha}_{\mu}^E \vec{E}_{in}(\vec{R}_T + \vec{r}_{\mu}), \quad (3.57)$$

donde $\overleftrightarrow{\alpha}_\mu^E$ describe el tensor de polarizabilidad eléctrica, descrito en (3.45), del átomo de la red en la posición \vec{r}_μ ; y $\vec{E}_{in}(\vec{R}_n + \vec{r}_\mu)$ representa el campo incidente que actúa sobre el dipolo \vec{p}_T (observar Figura 3.12). Cabe remarcar que el comportamiento en (3.57) corresponde a la respuesta a la partícula en ausencia de otros dispersores cercanos.

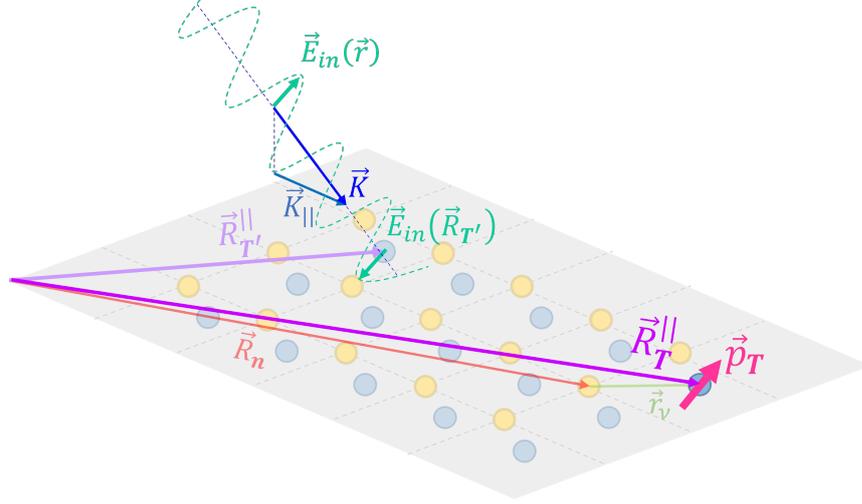


Figura 3.12: Esquema las estructuras periódicas de 2-D, así como asignación de las variables definidas para abordar el problema

Ahora bien, bajo esta aproximación, se tiene que un dipolo cualquiera en la red, \vec{p}_T , induce un campo eléctrico en el punto \vec{r} que se puede escribir en términos del tensor de interacción dipolo-dipolo, de tal manera que se tiene:

$$\vec{E}_{pT} = \frac{\omega^2}{\epsilon} \overleftrightarrow{G}_k(\vec{r}, \vec{R}_T) \cdot \vec{p}_T, \quad (3.58)$$

donde \overleftrightarrow{G}_k está dada por la ecuación (2.138), por lo que se enfatiza la omisión del subíndice e para denotar el tipo eléctrico de la función de Green, esto con el único fin de simplificar la notación. Además, puntualizamos que ϵ corresponde a la constante dieléctrica del medio donde se encuentran embebidas las partículas.

Congruentemente, al estudiar la respuesta completa de la red, dado que cada uno de los dipolos se encuentra acoplado por medio de interacciones con los demás, es necesario modelar la respuesta dipolar de los componentes de forma auto-consistente. De tal manera, se propone que el dipolo inducido $\vec{p}_{n,\nu}$, correspondiente a una partícula en una posición $\vec{R}_T = \vec{R}_n + \vec{r}_\nu$ cualquiera de la red, se modele por medio de:

$$\vec{p}_{n,\nu} = \overleftrightarrow{\alpha}_\nu^E \vec{E}_{in}(\vec{R}_n + \vec{r}_\nu) + \overleftrightarrow{\alpha}_\nu^E \sum_{\zeta=1}^N \sum_{\vec{R}_m \in \Lambda} \overleftrightarrow{G}_k(\vec{R}_n + \vec{r}_\nu, \vec{R}_m + \vec{r}_\zeta) \cdot \vec{p}_{m,\zeta}, \quad (3.59)$$

donde, de lado derecho de la igualdad, es posible identificar al primer término como la contribución debida a la respuesta individual y al segundo términos a la contribución debida a la interacción con los otros dispersores en el arreglo. Además, remarcamos explícitamente que el tensor dipolo-

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

dipolo \overleftrightarrow{G}_k está dada por:

$$\overleftrightarrow{G}_k(\vec{R}_n + \vec{r}_\nu, \vec{R}_m + \vec{r}_\zeta) = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \left[\left(k^2 \overleftrightarrow{I} + \nabla \otimes \nabla \right) \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{R}_m - \vec{r}_\zeta|}}{|\vec{r} - \vec{R}_m - \vec{r}_\zeta|} \right]_{\vec{r} = \vec{R}_n + \vec{r}_\nu}, \quad (3.60)$$

expresión que, implícitamente, nos restringe al análisis del problema en un espacio tridimensional al haber usado la función escalar para el caso $d = 3$ de la tabla 2.2. Asimismo, en la expresión anterior se tiene que: $\vec{R}_n - \vec{R}_m$ es la distancia entre la \mathbf{n} -celda y la \mathbf{m} -celda, $k = \omega\sqrt{\epsilon\mu}$ es el número de onda del medio homogéneo en el cual están embebidas las partículas del arreglo, y el símbolo ' en la suma es para indicar que el término $\mathbf{m} = \mathbf{n}$ es excluido cuando se tiene que $\zeta = \nu$, ya que el dipolo no puede interactuar consigo mismo.

Como se había anticipado, una observación astuta que ayuda a simplificar la expresión en (3.59) consiste en percatarse que el sistema cuenta con simetría de traslación con respecto a los vectores $\vec{R}_n \in \Lambda$. De tal manera, se debe conservar las propiedades de su respuesta de una celda a otra, es decir, el momento dipolar $\vec{p}_{n,\zeta}$ correspondiente a la \mathbf{n} -ésima celda debe ser proporcional al momento dipolar $\vec{p}_{m,\zeta}$ correspondiente a la \mathbf{m} -ésima celda, pudiendo diferir entre ellas por a lo más en una fase debido al cambio de celda (Observar Figura 3.13). En consecuencia, es congruente proponer:

$$\vec{p}_{n,\nu} = \vec{p}_\nu e^{i\vec{K}_\parallel \cdot \vec{R}_m} \quad \text{para cualquier } \vec{R}_n \in \Lambda,$$

donde el vector de \vec{K}_\parallel corresponde a la componente paralela del vector de onda del campo eléctrico incidente, donde éste último está dado por

$$\vec{E}_{in}(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} \quad \text{con } \vec{K} = k(\sin\theta \cos\varphi \hat{x} + \sin\theta \sin\varphi \hat{y} + \cos\theta \hat{z}), \quad k = \omega\sqrt{\epsilon\mu}. \quad (3.61)$$

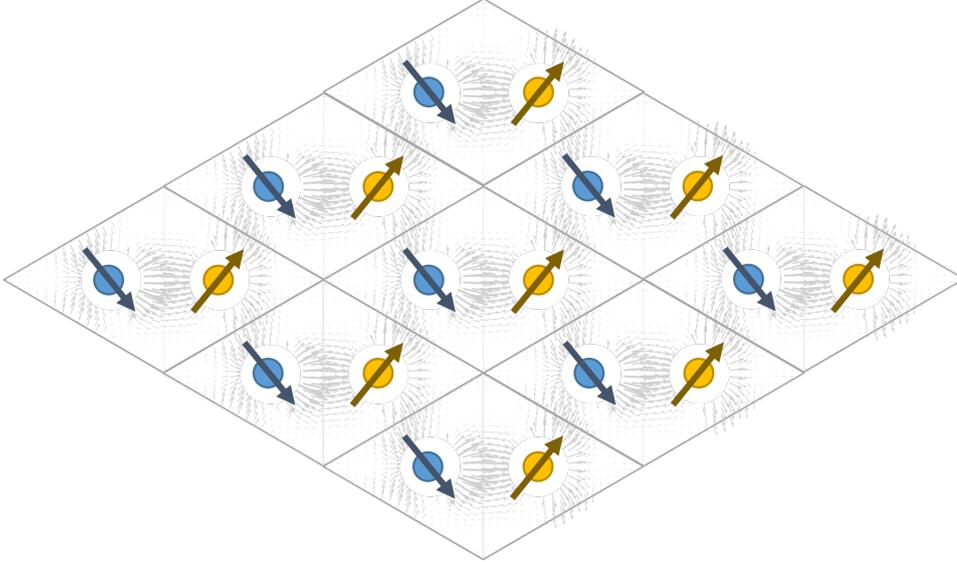


Figura 3.13: Ejemplo simetría de traslación, con respecto a los vectores base, de la dirección del momento dipolar de las partículas en una celda unitaria 2D. Se ilustra el caso donde la longitud de onda incidente coincide con la periodicidad del arreglo, por lo que la magnitud de los dipolos base se conserva. También se comprueba la continuidad de las líneas del campo de una celda a otra.

Es importante remarcar que el campo eléctrico incidente, definido en (3.61), corresponde a una onda plana con vector de polarización \vec{E}_0 y que el vector de onda \vec{K} está modelado por medio de las variables (r, θ, φ) de acuerdo a la convención en la Figura 2.3. Ahora bien, la suposición del campo incidente como una onda plana nos permitirá usar la solución de Mie para modelar la polarizabilidad de las partículas que conforman al arreglo; ya que, como se resolvió en la sección 3.2.2.3, la solución de Mie corresponde al caso en que excitamos a la partícula por medio de la interacción con un dipolo que se encuentra muy lejos de ella, de tal manera que la excitación externa se modela como una onda plana.

De esta manera, sustituyendo en la expresión (3.59) se obtiene:

$$e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} \sum_{\zeta} \delta_{\nu\zeta} \vec{p}_{\zeta} = \vec{p}_{\nu} = \overleftarrow{\alpha}_{\nu}^E \left\{ \vec{E}_0 e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} + \sum_{\zeta=1}^N \sum'_{\vec{R}_m \in \Lambda} \overleftarrow{G}_k \left(\vec{R}_n + \vec{r}_{\nu}, \vec{R}_m + \vec{r}_{\zeta} \right) \cdot \vec{p}_{\zeta} e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_m} \right\}$$

$$\Rightarrow \left[\sum_{\zeta=1}^N \left\{ \delta_{\nu\zeta} \left(\overleftarrow{\alpha}_{\zeta}^E \right)^{-1} - \sum'_{\vec{R}_m \in \Lambda} \overleftarrow{G}_k \left(\vec{R}_n + \vec{r}_{\nu}, \vec{R}_m + \vec{r}_{\zeta} \right) \vec{E}_0 e^{i\vec{K}_{\parallel} (\vec{R}_m - \vec{R}_n)} \right\} \right] \cdot \vec{p}_{\zeta} = \vec{E}_0. \quad (3.62)$$

La dependencia con respecto a los vectores de red se puede reducir aún al analizar explícitamente la dependencia del tensor \overleftarrow{G}_k con respecto a ellos. Para esto, es útil obtener una expresión algebraica del tensor y esto se logra haciendo usando la definición (2.137), de donde explícitamente se obtiene:

$$\left[\overleftarrow{G}_k \left(\vec{R}_n + \vec{r}_{\nu}, \vec{R}_m + \vec{r}_{\zeta} \right) \right]_{i,j} \sim \left[\left(k^2 \delta_{ij} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right) \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{R}_n - \vec{r}_{\zeta}|}}{|\vec{r} - \vec{R}_{(n_1, n_2)} - \vec{r}_{\zeta}|} \right]_{\vec{r} = \vec{r}_{\nu}}.$$

Usando notación de índices, es posible demostrar que:

$$\partial_{ij} \left[\frac{e^{ikr}}{r} \right] = (-k^2 r^3 \partial_i[r] \partial_j[r] + r^2 (ikr - 1) \partial_{ij}[r] - (ikr - 1) \partial_i[r] \partial_j[r^2]) \frac{e^{ikr}}{r^4}$$

$$\text{con: } \partial_i[r] = \frac{x_i}{r}, \quad \partial_i[r^2] = 2x_i, \quad \partial_{ij}[r] = \frac{1}{r^3} (\delta_{ij} r^2 - x_j x_i)$$

$$\Rightarrow \partial_{ij} \left[\frac{e^{ikr}}{r} \right] = \frac{e^{ikr}}{r^3} \{ (ikr - 1) \delta_{ij} + [-(kr)^2 + 3ikr - 3] x_i x_j \},$$

por lo que se obtiene:

$$\overleftarrow{G}_k \left(\vec{R} \right) = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{e^{ikR}}{R} \left\{ \left[k^2 + \frac{ik}{R} - \frac{1}{R^2} \right] \overleftarrow{I} - \left[k^2 + \frac{3ik}{R} - \frac{3}{R^2} \right] \hat{R} \otimes \hat{R} \right\}, \quad \vec{R} = \vec{r} - \vec{r}' \quad (3.63)$$

Así, la dependencia del tensor se puede escribir de la forma

$$\overleftarrow{G}_k \left(\vec{R}_n + \vec{r}_{\nu}, \vec{R}_m + \vec{r}_{\zeta} \right) = \overleftarrow{G}_k \left(\vec{R}_n - \vec{R}_m + \vec{r}_{\nu} - \vec{r}_{\zeta} \right).$$

De esto último, si renombramos $\vec{R}_l = \vec{R}_{n-m} = (\vec{R}_n - \vec{R}_m) \in \Lambda$ se puede sustituir el índice \mathbf{n} por el índice \mathbf{l} en la suma. En particular, el término de \mathbf{l} permite la exclusión de la auto-interacción cuando $\vec{r}_{\nu} \neq \vec{r}_{\zeta}$ de manera más sencilla, ya que, en este caso, la auto-interacción corresponde al caso en que $\vec{R}_l = \vec{R}_{0\Lambda}$.

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

Con base en las observaciones y resultados anteriores, la expresión (3.62) se reduce a:

$$\left[\sum_{\zeta=1}^N \left\{ \delta_{\nu\zeta} \left(\overleftrightarrow{\alpha}_{\zeta}^E \right)^{-1} - \sum'_{\vec{R}_n \in \Lambda} \overleftrightarrow{G}_k \left(\vec{R}_n + \vec{r}_{\nu} - \vec{r}_{\zeta} \right) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} \right\} \right] \cdot \vec{p}_{\zeta} = \vec{E}_0, \quad (3.64)$$

donde el símbolo ' hace referencia a que se excluye $\vec{R}_n = \vec{0}_{\Lambda}$ cuando $\vec{r}_{\nu} = \vec{r}_{\mu}$, ya que, sin pérdida de generalidad, hemos considerado que $\vec{R}_{\vec{0}_{\Lambda}} = \vec{0}_{\Lambda}$.

Adicionalmente, para obtener una notación con la que sea más sencilla operar el problema, proponemos una notación en términos de una operación matricial, la cual explícitamente está dada por:

$$\begin{bmatrix} \left(\overleftrightarrow{\alpha}_1^E \right)^{-1} + \sum_{\vec{R}_m \neq \vec{0}_{\Lambda}} \overleftrightarrow{G}_k \left(\vec{R}_m \right) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_m} & \sum_{\vec{R}_n} \overleftrightarrow{G}_k \left(\vec{R}_n + \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} & \dots \\ \sum_{\vec{R}_n} \overleftrightarrow{G}_k \left(\vec{R}_n + \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \right) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} & \left(\overleftrightarrow{\alpha}_2^E \right)^{-1} + \sum_{\vec{R}_n \neq \vec{0}_{\Lambda}} \overleftrightarrow{G}_k \left(\vec{R}_n \right) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \vec{p}_1 \\ \vec{p}_2 \\ \vdots \\ \vec{p}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{E}_0 \\ \vec{E}_0 \\ \vdots \\ \vec{E}_0 \end{bmatrix}$$

Simplificando la notación, reescribimos la expresión anterior de la forma

$$\boxed{\vec{p}_{\nu}(\vec{K}_{\parallel}) = \sum_{\mu=1}^N [\mathbb{M}^{-1}]_{\nu\mu} \cdot \vec{E}_0}, \quad (3.65)$$

donde el exponente -1 denota a la matriz inversa de \mathbb{M} , la cual tiene una dimensión de $3N \times 3N$ y es definida por bloques por medio de:

$$\boxed{\overleftrightarrow{M}_{\nu\mu} = \begin{cases} \left(\overleftrightarrow{\alpha}_{\nu}^E \right)^{-1} + \sum_{\vec{R}_n \neq \vec{0}_{\Lambda}} \overleftrightarrow{G}_k \left(\vec{R}_n \right) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} & \text{para } \mu = \nu. \\ \sum_{\vec{R}_n} \overleftrightarrow{G}_k \left(\vec{R}_n + \vec{r}_{\nu} - \vec{r}_{\mu} \right) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} & \text{para } \mu \neq \nu. \end{cases}} \quad (3.66)$$

Con base en los resultados anteriores se observa que, al calcular los términos de la matriz \mathbb{M} dados en (3.66) y usando estos resultados para calcular la matriz inversa de la misma, se puede calcular el momento dipolar de las partículas en la red con base en la ecuación (3.65), donde el momento dipolar obtenido contempla la respuesta colectiva de la red. De esta manera, uno de los primeros objetivos contemplados para resolución de la respuesta óptica de cristales plasmónicos por medio del método de dipolos acoplados consiste en el cálculo de los términos involucrados en expresión (3.66).

Es interesante observar que los términos en la ecuación (3.66) separa las propiedades de las partículas, cuantificada por el tensor de polarizabilidad pura $\overleftrightarrow{\alpha}^E$, de las propiedades de la red, las cuales están cuantificadas por el tensor $\sum_{\vec{n}} \overleftrightarrow{G}_k(\vec{R}_n)$, el cual es un tipo de factor de estructura. Este resultado en el cual se muestra una separación de propiedades concuerda con el espíritu del método de Korringa-Kohn Rostoka (KKR) en la física del estado sólido [38].

Ahora bien, es importante remarcar que calcular el término

$$\boxed{\overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\nu\mu}^{\neq} = \sum'_{\vec{R}_n \in \Lambda} \overleftrightarrow{G}_k(\vec{R}_n, \vec{r}_{\nu\mu}) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n}} \quad (3.67)$$

es una de las principales problemáticas, ya que teóricamente requiere realizar una suma infinita de términos. Más aún, este término depende completamente la geometría de la matriz por lo que sera necesario abordarlo con base en las simetrías de cada arreglo. Asimismo, dado que contiene toda la información de la periodicidad del problema, este determina la respuesta óptica de la red en función de su geometría. En particular, este término controla la existencia y propiedades de las resonancias reticulares soportadas por el arreglo periódico, por lo que es de suma importancia calcularlo de manera correcta para que las interpretaciones físicas derivadas de los resultados sean fiables.

Cabe mencionar que en la literatura a la expresión dada en (3.67) se le conoce con el nombre **suma reticular**. Este suele ser un término común en el estudio de la propagación de ondas en estructuras periódicas. Estas ondas pueden ser de diferentes naturaleza y esto depende de la función de Green $G_k(\vec{R})$ que se sustituya en la expresión. En el caso particular de este trabajo, al haber usado la función de Green de la ecuación de Helmholtz escalar para la definición del tensor de interacción dipolo-dipolo, al sustituir \overleftrightarrow{G}_k en la fórmula nos restringiremos a resolver la **suma reticular para la ecuación de Helmholtz escalar**.

Con el propósito de progresar en el estudio de la respuesta óptica de la red antes de la implementación del método a casos particulares, en este punto del estudio supondremos que conocemos el resultado de la suma reticular, de tal manera que podemos calcular el momento dipolar de cada partícula de la red por medio de la ecuación (3.65). Consecuentemente, partiremos de este resultado para modelar el campo eléctrico total producido por la red al interactuar con una onda plana, la cual simula un láser en la vida real.

3.5. CDM: Respuesta óptica de la red

En la sección anterior estudiamos la respuesta de partículas en una red periódica d_{Λ} -dimensional debido a que se iluminan con ondas planas de luz. Así, al establecer el momento dipolar inducido en la partícula de forma coherente al campo incidente y el campo producido por todos los demás dipolos en el arreglo, se obtuvo la expresión para el momento dipolar \vec{p}_{ν} correspondiente a la ν -ésima partícula en la celda unitaria (ec. 3.65), donde se identifica a la matriz M^{-1} como un tipo de polarizabilidad efectiva del cristal. Ahora bien, una vez que se han calculado los momentos dipolares inducidos, dado el campo incidente, uno puede calcular distribución del campo eléctrico inmediatamente de la relación:

$$\boxed{\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_{in}(\vec{r}) + \sum_{\nu=1}^N \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} \overleftrightarrow{G}_k(\vec{r}, \vec{R}_n + \vec{r}_{\nu}) \cdot \vec{p}_{\nu} e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot (\vec{R}_n + \vec{r}_{\nu})}}, \quad (3.68)$$

donde \vec{r} representa la posición donde se calcula el campo eléctrico, $\vec{R}_n + \vec{r}_{\nu}$ caracterizan las posiciones de las partículas en la red, \vec{E}_{in} es el campo incidente dado en (3.61) y \overleftrightarrow{G}_k es el tensor de interacción dipolo-dipolo de la expresión (3.60). En la expresión anterior se observa que el

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

segundo término de lado derecho de la igualdad describe el campo esparcido por la red, por lo que definiremos dicho términos por medio de:

$$\vec{E}_{sc}(\vec{r}) = \sum_{\nu=1}^N \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} \overleftrightarrow{G}_k(\vec{r}, \vec{R}_n + \vec{r}_\nu) \cdot \vec{p}_\nu e^{i\vec{K}_{||} \cdot (\vec{R}_n + \vec{r}_\nu)}, \quad (3.69)$$

donde podemos identificar que el problema relacionado a la respuesta de la red queda expresado como un problema de dispersión óptica, como era de esperarse.

Por otra parte, congruente con los métodos experimentales, para el estudio de la respuesta óptica de los materiales se puede calcular o medir la intensidad de luz que dispersa la muestra y que es registrada por un detector, como por ejemplo un espectrómetro (revisar apéndice C.2). Dicha luz, dado que interactúa con la muestra, lleva información de la misma. De esta manera, es usual estudiar la respuesta óptica del sistema en función de la luz reflejada y transmitida por la muestra. Ahora bien, comúnmente los detectores son sensibles a la intensidad de luz, puesto que registran la energía recibida con respecto a un promedio temporal (respuesta del detector) y un promedio sobre una área (tamaño del detector). De esta manera, las mediciones de **reflectividad** \mathcal{R} y **transmisividad** \mathcal{T} (relacionadas con el registro de luz reflejada y transmitida, respectivamente) se describen analíticamente con base en el vector de Poynting, el cual está dado por:

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \quad \text{de tal manera que:} \quad [\vec{S}] = \frac{W}{s * m^2},$$

definición que se discute con mayor detalle en el apéndice A.2.

En este mismo contexto, en el caso particular de este trabajo, adoptaremos la definición de dichas cantidades con base en las definición usual para el caso de una interfase entre dos medios. Como se puede consultar en la referencia [39], se caracteriza la reflectividad y transmisividad para dos interfases por medio de las relaciones

$$\mathcal{R} = -\frac{\vec{S}^{(r)} \cdot \hat{n}}{\vec{S}^{(in)} \cdot \hat{n}} \quad ; \quad \mathcal{T} = \frac{\vec{S}^{(t)} \cdot \hat{n}}{\vec{S}^{(in)} \cdot \hat{n}}, \quad (3.70)$$

donde \hat{n} representa el vector unitario normal a la interfase y los subíndices (r) y (t) hacen referencia a la luz que se refleja o se transmite. Para aterrizar dichas definiciones, en la Figura 3.14 se esquematiza la asignación de etiquetas para el caso de interés en este trabajo. Es importante remarcar que en la practica es común medir únicamente una de las dos cantidades, es decir o reflectividad o transmisividad. Esto se debe a que en la mayoría de los experimentos solo una de ellas predomina con base en la característica de la muestra, como son el sustrato, la densidad de dispersores o el tamaño de los mismos. De esta manera, las características del material definirán cual de las dos cantidades es experimentalmente accesible para ser medida. Por ejemplo, en el caso de que la muestra estén soportadas en un medio transparente, la mayoría de la luz incidida traspasar la muestra y, por lo tanto, únicamente se podrá medir la transmisividad. Con base en el ejemplo, en este trabajo nos concentraremos en formular la expresión para el cálculo de las transmisividad, la cual, al ser aplicada a un problema de esparcimiento del estilo $\vec{S}_T = \vec{S}^{(in)} + \vec{S}^{(sca)}$, hasta este punto del análisis estará dada por:

$$\mathcal{T} = 1 + \frac{\vec{S}^{(sca)} \cdot \hat{n}}{\vec{S}^{(in)} \cdot \hat{n}}. \quad (3.71)$$

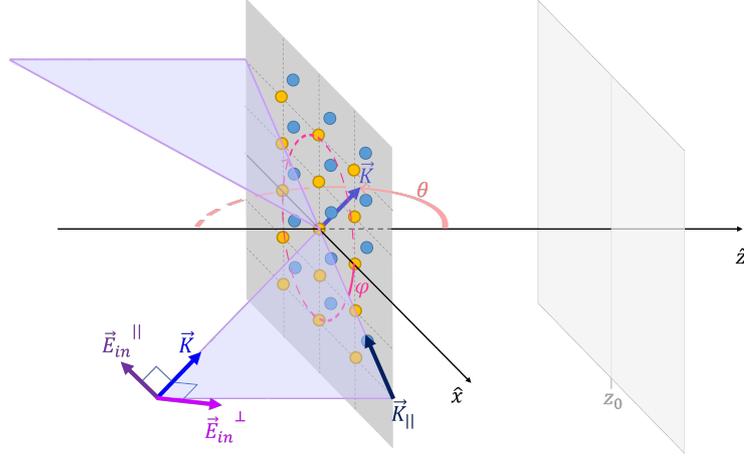


Figura 3.14: Esquema para la definición de las etiquetas de reflejado y transmitido con respecto a la muestra.

Ahora bien, al comparar la longitud de onda de la luz visible que incide con respecto a la distancia en la que se mide, es posible afirmar que, en la práctica, la mayoría de las mediciones, si no es que todas, se realizan en el régimen de campo lejano ($rk \gg \lambda$). Esta afirmación nos ayuda a simplificar las relaciones asociadas al cálculo del campo total en la posición del detector. De esta manera, con base en esta suposición, nos podemos restringir a estudiar el vector de Poynting en dicho régimen, el cual, de acuerdo al resultado en (A.37), está dado por:

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \right] |\vec{E}|^2 \hat{r},$$

donde los brackets denotan promedio temporal, es decir $\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2T} \int_{-T/2}^{T/2} \text{Re} \left[\vec{E} \times \vec{H} \right] dt$, T es el periodo de los campos y ϵ y μ modelan las propiedades ópticas del medio donde se encuentra el detector, las cuales, en el caso abordado en el presente trabajo, coinciden con las propiedades ópticas del medio en el cual se encuentran embebidas las partículas del arreglo periódico, dado que no existen otro medio en el sistema. De esta manera, sustituyendo el resultado en la definición de transmisividad, se obtiene:

$$\langle \mathcal{T} \rangle = 1 + \frac{|\vec{E}_{sc}| \hat{r} \cdot \hat{n}}{|\vec{E}_0| \hat{K} \cdot \hat{n}}. \quad (3.72)$$

Congruente con la expresión (3.72), observamos que para calcular la transmisividad es suficiente concentrarse en calcular el campo eléctrico esparcido (\vec{E}_{sc}) en la superficie del detector.

3.5.1. Campo lejano

En el mismo contexto, dado que nos interesa calcular el campo esparcido en el régimen de campo lejano, introduciremos la descomposición espectral de la función de Green escalar, dada por:

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{i}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}-\vec{r}') + iq_z Q|z-z'|} \frac{dq_x dq_y}{q_z}, \quad (3.73)$$

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

donde $\vec{Q} = (q_x, q_y)$ y se requiere que la parte imaginaria de $q_z^2 = k^2 - Q^2$ se mantenga positiva para todos los valores q_x, q_y en la integración. Cabe mencionar que la expresión (3.73) es conocida con el nombre de identidad de Weyld, [22], y se fundamenta en el esquema de espectro angular, teoría expuesta en la sección C.2 de apéndice C. Usando este resultado y haciendo un análisis componente a componente, observamos que los elementos de la función de Green diádica (3.60) están dados por:

$$\begin{aligned} \left[\overleftrightarrow{G}_k(\vec{r} - \vec{r}') \right]_{ij} &= \frac{1}{4\pi\epsilon} \left\{ (k^2\delta_{ij} + \partial_i\partial_j) \left[\frac{i}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{Q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}') + iq_z|z-z'|} \frac{dq_x dq_y}{q_z Q} \right] \right\} \\ &= \frac{i}{8\pi\epsilon} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\vec{Q}}{q_z} (k^2\delta_{ij} + q_i q_j) e^{i\vec{Q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}') + iq_z|z-z'|} \end{aligned}$$

Simplificando la expresión con base en la notación del producto tensorial \otimes , se obtiene:

$$\boxed{\overleftrightarrow{G}_k(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{i}{8\pi\epsilon} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\vec{Q}}{q_z Q} \overleftrightarrow{M}(\vec{q}) e^{i\vec{Q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}') + iq_z|z-z'|}}, \quad (3.74)$$

donde se ha definido

$$\boxed{\overleftrightarrow{M}(\vec{Q}) = k^2 \overleftrightarrow{I} + \vec{q} \otimes \vec{q}} \quad \text{para} \quad \vec{q} = (q_x, q_y, q_z Q) = (\vec{Q}, q_z Q). \quad (3.75)$$

Consecuentemente, sustituyendo el resultado (3.74) en la expresión (3.69) e intercambiando la suma por la integral, se obtiene que el campo esparcido está dado por:

$$\vec{E}_{sc}(\vec{r}) = \frac{i}{8\pi\epsilon} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\vec{Q}}{q_z Q} \overleftrightarrow{M}(\vec{q}) e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r} + iq_z|z-z'|} \sum_{\nu=1}^N e^{i(\vec{K}_{||} - \vec{Q})\cdot\vec{r}_\nu} \left[\sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} e^{-i(\vec{Q} - \vec{K}_{||})\cdot\vec{R}_n} \right] \cdot \vec{p}_\nu.$$

Para simplificar la expresión anterior, uno puede usar la fórmula de la suma Poisson, la cual permite reescribir las expresiones en términos del espacio recíproco. Explícitamente, la fórmula de la suma de Poisson está dada por:

$$\sum_{\vec{R}_m \in \Lambda} f(\vec{R}_m) = \frac{(2\pi)^{d_\Lambda/2}}{\mathcal{A}} \sum_{\vec{K}_m \in \Lambda^*} F(\vec{K}_m), \quad (3.76)$$

donde f representa un función evaluada en el espacio real, \vec{K}_m representa el m -ésimo vector recíproco, de manera consistente con la notación usada en la sección 3.4.0.1; y F representa la transformada de Fourier d_Λ -dimensional de la función $f(\vec{r})$. Particularmente, cuando la función f corresponde a la función exponencial, se obtiene:

$$\sum_{\vec{R}_m \in \Lambda} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}_m} = \frac{(2\pi)^{d_\Lambda/2}}{\mathcal{A}} \sum_{\vec{K}_m \in \Lambda^*} \delta(\vec{K} - \vec{K}_m). \quad (3.77)$$

Así, sustituyendo el resultado (3.77) en la versión integral de la función de Green diádica, se obtiene:

$$\vec{E}_{sc}(\vec{r}) = \frac{i}{8\pi\epsilon} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\vec{Q}}{q_z Q} \overleftrightarrow{M}(\vec{q}) e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r} + iq_z|z-z'|} \sum_{\nu=1}^N e^{i(\vec{K}_{||} - \vec{Q})\cdot\vec{r}_\nu} \left[\frac{2\pi}{\mathcal{A}} \sum_{\vec{K}_m \in \Lambda^*} \delta(\vec{Q} - \vec{K}_{||} - \vec{K}_m) \right] \cdot \vec{p}_\nu$$

Por otra parte, es importante advertir que para proceder a calcular el campo dispersado es primordial calcular el momento dipolar inducido en (3.67), el cual involucra el cálculo de una suma reticular. Consecuentemente, en este punto del análisis es importante cuestionarse la viabilidad de la solución, ya que esta está en función de una suma infinita.

En primera instancia, para abordar el cálculo de la suma reticular, se puede proponer un cálculo computacional. Esto, debido a las limitaciones computacionales, requerirá definir un número finito de celdas unitarias en el que se realice el cálculo. De esta manera, parecería que el problema se reduce en la construcción del código computacional y a la elección del número de celdas en las que se ejecutará la suma. Sin embargo, un detalle importante que se debe contemplar es si la suma infinita converge, ya que, con base en la teoría de sumas infinitas, para que una suma parcial (o truncada) converja al mismo resultado que la suma infinita, se requiere percé que la suma infinita converja [21]. Alternativamente, si se pretende evadir este problema considerando un número grande de celdas para tratar de reproducir lo mejor posible la suma infinita de términos, el usuario se topará con las limitaciones computacionales de memoria RAM y tiempo de cómputo. Más aún, un detalle que es importante al estudiar problemas con diferente dimensional es que las sumas reticulares suelen ser condicionalmente convergentes al ser series alternantes en su mayoría, por lo que el orden en el que se realice la suma requiere de un mayor análisis. De esta manera, aunque la resolución del problema por medio de cálculos computacionales es una alternativa, es evidente que se debe confirmar que la suma reticular cumpla ciertas condiciones para que la implementación computacional sea fiable.

Con base en los argumentos anteriores, se puede deducir que el cálculo de la suma reticular no es un cómputo trivial y requiere un tratamiento especial, por lo que a continuación abordaremos con mayor detalle algunos aspectos teóricos para su correcta resolución, tales como la definición de la función de Green cuasi-periódica y el método de Ewald [40][41]. Estos métodos abordan la suma reticular para la ecuación de Helmholtz escalar y la convierten en dos sumas rápidamente convergentes. Así, con el propósito de fundamentar el desarrollo de los métodos antes mencionados, a continuación abordaremos un tratamiento especial de la suma reticular.

3.5.2. Suma Reticular

La suma reticular que se debe abordar para resolver el problema de momentos dipolares inducidos está dada por la expresión (3.67), a saber:

$$\overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\nu\mu}^{\neq} = \sum'_{\vec{R}_{\mathbf{n}} \in \Lambda} \overleftrightarrow{\mathcal{G}}_k(\vec{r}_{\mu\nu}, \vec{R}_{\mathbf{n}}) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_{\mathbf{n}}},$$

donde el vector de posición $\vec{r}_{\mu\nu}$ representa la diferencia entre dos vectores base, de tal manera que $\vec{r}_{\mu\nu} = \vec{r}_{\mu} - \vec{r}_{\nu}$. Ahora bien, dado que los vectores base representan una posición cualquier dentro de la celda unitaria, podemos considerar que puede ser evaluado en una infinidad de valores. Por otra parte, los vectores $\vec{R}_{\mathbf{n}} = \sum_{i=1}^{d_{\Lambda}} n_i \vec{a}_i$ representa posiciones periódicas con respecto a los vectores base \vec{a}_i ; y el símbolo ' en la suma hace referencia a que se excluye el caso en que $\vec{R}_{\mathbf{n}} \neq \vec{0}_{\Lambda}$ cuando $\mu = \nu$.

Particularmente, para abordar la suma reticular es conveniente analizar la forma de $\overleftrightarrow{\mathcal{G}}_k$ para obtener expresiones escalares más sencillas de manipular. Consecuentemente, sustituyendo

explícitamente el tensor de interacción (3.60) en la suma reticular, se obtiene:

$$\frac{1}{\epsilon} \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} e^{ik\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} \left(k^2 \overleftarrow{T} + \nabla \otimes \nabla \right) G_k(\vec{r}, \vec{R}_n) = \left(k^2 \overleftarrow{T} + \nabla \otimes \nabla \right) \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} \left[G_k(\vec{r}, \vec{R}_n) e^{ik\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n} \right], \quad (3.79)$$

expresión en la que se nos ha permitido intercambiar la suma y el factor exponencial con el operado, esto es debido a que los operadores diferenciales son lineales y las operaciones diferenciales aplicadas solo se realizan con respecto al vector de posición $\vec{r}_{\mu\nu}$. Con base en el resultado, se observa que la suma reticular en (3.67) se resume en gran parte a calcular la suma dada por:

$$\sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} G_k(\vec{r}, \vec{R}_n) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n},$$

el cual comprende menor dificultad al compararlo con la suma reticular, debido a que involucra una función escalar en lugar de una función diádica. Más aún, dado que el estudio de la suma involucrada es más sencilla de abordar cuando no se excluye ningún caso en el argumento, procedemos a expresar la suma de la siguiente forma:

$$\overleftarrow{\mathcal{G}}_{\nu\mu}^{\neq} = \frac{1}{\epsilon} \lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{0}_{\Lambda}} \left\{ \left(k^2 \overleftarrow{T} + \nabla \otimes \nabla \right) \left[G_{\Lambda}(\vec{r} - \vec{r}_{\nu\mu}; \vec{K}_{\parallel}) - \delta_{\nu\mu} G_{\vec{0}_{\Lambda}}(\vec{r} - \vec{r}_{\nu\mu}) \right] \right\} \quad (3.80)$$

$$\text{donde: } \boxed{G_{\Lambda}(\vec{r}; \vec{K}_{\parallel}) = \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} G_k(\vec{r}, \vec{R}_n) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n}} \quad ; \quad G_{\vec{0}_{\Lambda}}(\vec{r}) = G_k(\vec{r}) e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_n}. \quad (3.81)$$

De esta manera observamos que el problema se reduce a calcular la suma lentamente convergente $G_{\Lambda}(\vec{r}; \vec{K}_{\parallel})$ y tomar el límite $\vec{r} \rightarrow \vec{0}_{\Lambda}$. Sin embargo, es importante remarcar que resolver la suma G_{Λ} no resuelve por completo el problema de interés; por esta razón, al término (3.81) se le denomina como **función de Green cuasi-periódica** en la literatura.

La naturaleza desafiante de la función de Green cuasi-periódica para el método de dipolos acoplados radica en el hecho de que son poco convergentes con respecto a la evaluación de los términos en el espacio real. Esto se debe al hecho de que la función de Green escalar G_k solo tiene una caída de $1/r$. Para superar esto, podemos seguir directamente la formulación de Linton en la referencia [42], el cual propone dividir la suma en dos partes, un sobre el espacio real y otra sobre el espacio recíproco, de tal manera que cada una de ellas convergen exponencialmente. Para logra este cometido, es necesario explotar fuertemente las propiedades de periodicidad, para lo que nos será útil hacer un estudio particular de la función de Green cuasi-periódica.

3.5.2.1. Función de Green Cuasi-Periódica

Una función de Green cuasi-periódica es una redmatriz de fuentes moduladas por un factor de fase regido por el vector de Bloch $\vec{\beta}$. Formalmente:

$$G_{\Lambda}(\vec{r}; \vec{\beta}) = \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} G_k(\vec{r}, \vec{R}_n) e^{i\vec{\beta} \cdot \vec{R}_n}, \quad (3.82)$$

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

A la expresión de la función de Green cuasi-periódica en (3.82) se le conoce con el nombre de **suma espacial**. Su definición se propone con base en los cálculos de estructuras electrónicas abordados en la teoría del estado sólido, como se reporta en la referencia [43], donde se justifica la propuesta de utilizar sumas de Bloch obtenidas al remplazar las fuentes G_k por funciones que tienen el mismo comportamiento de campo lejano, pero que se han suavizado artificialmente en el origen.

Por otra parte, para darle sentido a la función de Green cuasi-periódica, es necesario explotar la propiedad de simetría traslación con respecto a los vectores periódicos $\vec{R}_n \in \Lambda$. En particular, para aplicar la fórmula observamos que:

$$G_\Lambda(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} G_k(\vec{r}, \vec{R}_n) = \frac{(2\pi)^{d_\Lambda/2}}{\mathcal{A}} \sum_{\vec{K}_m \in \Lambda^*} g_k^\Lambda(\vec{r}, \vec{K}_m), \quad (3.83)$$

donde la función g_k^Λ representa la transformada de Fourier d_Λ -dimensional de la función de Green escalar. De esta manera, consistentemente con la expresión en (2.54), se tiene que:

$$g_k^\Lambda(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{d_\Lambda/2}} \int_{\mathbb{R}^{d_\Lambda}} G_k(\vec{r}, \vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\Omega_{d_\Lambda}(\vec{r}).$$

Una observación importante de remarcar es el hecho de que el procedimiento para calcular la transformada de Fourier $d_\Lambda = 3$ -dimensional de la función de Green $d = 3$ -dimensional ya ha sido descrito en la sección 2.3, ya que la función g_k que se utilizaba para la resolución de la función de Green de la ecuación escalar de Helmholtz, correspondía al caso 3-dimensional. De esta manera, usando los resultados (2.57) y la definición (2.58), demostramos que la función g_k para el caso en que $d = 3 = d_\Lambda$ está dada por:

$$g_k^3(\vec{r}, \vec{q}) = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}}{-q^2 + k^2} \Rightarrow G_\Lambda(\vec{r}) = \frac{1}{\mathcal{A}} \sum_{\vec{q}_m \in \Lambda^*} \frac{e^{i\vec{q}_m\cdot\vec{r}}}{-q_m^2 + k^2} \quad (d = 3 = d_\Lambda)$$

En general $\vec{\beta}_m = \vec{\beta} + \vec{q}_m$: $G'_\Lambda(\vec{r}; \vec{\beta}) = \frac{1}{\mathcal{A}} \sum_{\vec{q}_m \in \Lambda^*} \frac{e^{i\vec{\beta}_m\cdot\vec{r}}}{-\beta_m^2 + k^2} \quad (d = d_\Lambda), \quad (3.84)$

No obstante, es importante remarcar que el resultado anterior solo nos serviría si el cristal periódico fuera de la misma dimensional que la función de Green usada. Si embargo, el problema de interés en este trabajo consiste en el estudio $d = 3$ -dimensional de cristales $d_\Lambda = 2$ -dimensionales, por lo que se requiere de un cálculo más preciso para el caso $d - d_\Lambda = 1$.

En general, para resolver Transformada de Fourier $(d - 1)$ -dimensional es conveniente analizar a los vectores de posición $\vec{\rho}$ en términos de su componente paralela y perpendicular al cristal, es decir:

$$\vec{\rho} = \vec{\rho}^{\parallel} + \vec{\rho}^{\perp}, \quad (3.85)$$

donde $\vec{\rho}^{\parallel}$ y $\vec{\rho}^{\perp}$ coinciden con la definición propuesta en (3.56). Ahora bien, aplicando la transformada de Fourier $(d - 1)$ -dimensional a la ecuación de Helmholtz escalar para $\vec{\rho} = \vec{r} - \vec{r}'$, de manera análoga a como se hizo en la sección 2.3, se obtiene que la transformadas de la función de Green d -dimensional debe estar dada por:

$$-(2\pi)^{d/2} g_k^d(\vec{t}) = \frac{e^{i\vec{t}\cdot\vec{\rho}}}{-t^2 + k^2} = \frac{e^{i(\vec{t}^{\parallel} + \vec{t}^{\perp})\cdot(\vec{\rho}^{\parallel} + \vec{\rho}^{\perp})}}{k^2 - (t^{\parallel})^2 - (t^{\perp})^2} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{e^{ik\vec{q}\cdot\vec{\rho}^{\parallel} + \vec{t}^{\perp}\cdot\vec{\rho}^{\perp}}}{k^2(1 - q^2) - (t^{\perp})^2 + i\epsilon},$$

donde se ha definido $k\vec{q} = \vec{t}^\parallel$, $q = |\vec{q}|$ y hemos escrito al número de onda k explícitamente en su parte imaginaria (ε) y real (k). Ahora bien, sustituyendo este resultado en la transformada de Fourier de la función de Green \mathbf{d} -dimensional se obtiene:

$$G_k(\vec{\rho}) = \frac{k^{\mathbf{d}-1}}{(2\pi)^{\mathbf{d}}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^{\mathbf{d}-1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i k \vec{q} \cdot \vec{\rho}^\parallel + \vec{t}^\perp \cdot \vec{\rho}^\perp}}{k^2(1-q^2) - (t^\perp)^2 + i\varepsilon} dt^\perp d\Omega_{\mathbf{d}-1}(\vec{q}),$$

donde se impone el límite $\varepsilon \rightarrow 0^+$ para hacer explícita la condición de no absorción del medio homogéneo (espacio libre). Por otra parte, para calcular la integral con respecto a t^\perp , se propone el cambio de variable $w^2 = k^2(1-q^2) + i\varepsilon$. Ahora bien, de manera similar a como se discutió en la sección 2.3, la integral debe ser cerrada en el semiplano apropiado dependiendo del signo de ε (teorema de Jordan), que en este caso corresponderá al caso en que la variable w esté en la mitad superior del plano. Además, para la integral de interés, es necesario definir una función γ :

$$\gamma(t) = \begin{cases} \sqrt{t^2 - 1} & |t| \geq 1 \\ -i\sqrt{1 - t^2} & |t| < 1 \end{cases},$$

con el fin de que la función sea analítica. De esta manera, se puede demostrar que:

$$\begin{aligned} G_k(\vec{\rho}) &= \frac{k^{\mathbf{d}-1}}{(2\pi)^{\mathbf{d}}} \int_{\mathbb{R}^{\mathbf{d}-1}} e^{i k \vec{q} \cdot \vec{\rho}^\parallel} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\vec{t}^\perp \cdot \vec{\rho}^\perp} dt^\perp}{(i k \gamma(q) - t^\perp)(i k \gamma(q) + t^\perp)} \right] d\Omega_{\mathbf{d}-1}(\vec{q}) \\ &= -\frac{\pi k^{\mathbf{d}-2}}{(2\pi)^{\mathbf{d}}} \int_{\mathbb{R}^{\mathbf{d}-1}} e^{i k \vec{q} \cdot \vec{\rho}^\parallel} e^{-k \gamma(q) |\vec{\rho}^\perp|} \frac{d\Omega_{\mathbf{d}-1}(\vec{q})}{\gamma(q)}. \end{aligned} \quad (3.86)$$

Así, dado que el argumento de la integral corresponde a la transformada de Fourier $(d-1)$ -dimensional de la función de Green, se puede sustituir este resultado en la expresión (3.83) para obtener:

$$G_\Lambda(\vec{r}; \vec{\kappa}_{\mathbf{m}}) = -\frac{1}{2\mathcal{A}} \sum_{\vec{K}_{\mathbf{m}} \in \Lambda^*} (k \gamma_{\mathbf{m}})^{-1} e^{i \vec{\kappa}_{\mathbf{m}} \cdot \vec{r}^\parallel} e^{-k \gamma_{\mathbf{m}} |\vec{r}^\perp|} \quad (\mathbf{d} - \mathbf{d}_\Lambda = 1), \quad (3.87)$$

con $\vec{\kappa}_{\mathbf{m}} = \vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}$ como en el caso anterior, y

$$\gamma_{\mathbf{m}} = \gamma(\kappa_{\mathbf{m}}/k) = \begin{cases} \frac{1}{k} \sqrt{|\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}|^2 - k^2} & \text{si } k \leq |\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}| \\ \frac{-i}{k} \sqrt{k^2 - |\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}|^2} & \text{si } |\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}| < k \end{cases}, \quad (3.88)$$

donde ya hemos sustituido el caso en que $\vec{\beta} = \vec{K}_{\parallel}$, que es el de nuestro interés. Es importante observar que la expresión obtenida muestra explícitamente singularidades cuando ($k \gamma_{\mathbf{m}} = 0$), lo cual ocurren siempre y cuando los valores de $\vec{K}_{\mathbf{m}}$ y \vec{K}_{\parallel} sean tal que $\beta_{\mathbf{m}} = |\vec{K}_{\mathbf{m}} + \vec{K}_{\parallel}| = k$.

Por otra parte, en contraste a la suma espacial dada en (3.82), a la expresión (3.87) se le conoce con el nombre de **suma dual**. Ciertamente, al compara la expresión obtenida para el caso $\mathbf{d} = \mathbf{d}_\Lambda$ con las obtenidas para el caso en el $\mathbf{d} - \mathbf{d}_\Lambda = 1$, es interesante observar que la forma de la representación espectral se ve determinada por el valor de la codimensión $\mathbf{d} - \mathbf{d}_\Lambda$. A su vez, también es interesante observar que la dependencia de la suma dual con respecto a la codimensión difiere de la dependencia de la representación espacial (a través de la forma de G_k) con respecto a la dimensión \mathbf{d} , lo cual representa una posible ventaja en el análisis de la función de Green cuasi-periódica en términos de la expresión analítica usada.

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

Posteriormente, con base en las expresiones de las sumas de red que se han obtenido, a estas alturas del estudio se puede hacer un análisis de la convergencia de la función de Green cuasi-periódica en función de la expresión considerada de la misma, es decir, si se opera con base en la suma espacial (3.82) o con base en la suma dual (3.87).

En general, para analizar la convergencia de las series de red, es necesario recurrir a la teoría de números complejos. En esta se define que la serie de números complejos:

$$\sum_{n=1}^{\infty} z_n = z_1 + z_2 + \cdots + z_n + \cdots = S \quad (3.89)$$

converge si al valor S si la secuencias de sumas parciales, dadas por

$$S_N = \sum_{n=1}^N z_n = z_1 + z_2 + \cdots + z_N \quad (N = 1, 2, \cdots)$$

convergen al valor S , lo cual confirma que analizando sumas parciales podríamos aproximar la suma infinita, si es que la serie de sumas parciales converge. Otra propiedad importante de la serie de número complejos es la convergencia absoluta, esta se da si, para $z_n = x_n + iy_n$, la serie real dada por

$$\sum_{n=1}^{\infty} |z_n| = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{x_n^2 + y_n^2} \quad (3.90)$$

converge. Más aún, dado que la **convergencia absoluta** de series reales implica la unicidad del resultado de la suma, también se deduce que la convergencia absoluta de una serie de números complejos implica la unicidad del resultado de la suma compleja infinita. De esta manera, si la suma (3.90) converge, automáticamente podemos afirmar que la suma en (3.89) converge. No obstante, es muy importante remarcar que si la serie de los valores absolutos (3.90) no converge, eso no necesariamente significa que la serie original (3.89) no converja, de hecho, en estos caso se dice que la suma es **condicionalmente convergente**, por lo que se requiere de un mayor análisis. En particular las series condicionalmente convergentes suelen depender de la manera en que se van sumando los términos, por lo que en este tipo de series se trata de reescribir la expresión para revelar el verdadero resultado de la suma.

Consecuentemente, considerando las definiciones de convergencia dadas, es posible observar que para el caso $\mathbf{d} = \mathbf{d}_\Lambda$, la serie dual sigue siendo solo condicionalmente convergente, pero cuando $\mathbf{d} > \mathbf{d}_\Lambda$ (y $|\vec{r}^\perp| > 0$), la serie es exponencialmente convergente, por lo que podríamos considerar usar este resultado para implementar la suma de red involucrada en el cálculo del campo esparcido (3.69) para la condición de campo lejano. Desafortunadamente, la tasa de convergencia de la expresión (3.87) se deteriora a medida que $|\vec{r}^\perp|$ tiende a cero, de tal manera que resulta ser condicionalmente convergente cuando $|\vec{r}^\perp| = 0$, el cual corresponde al caso requerido ya que corresponde al caso en que se evalúa el campo en el plano del cristal plasmónico para calcular los momentos dipolares inducido. Por consiguiente, concluimos que las series dual tienen limitaciones en uso práctico y por lo que ni la serie espacial ni la dual pueden usarse para implementar esquemas computacionales eficientes para G_Λ .

Como se señaló con anterioridad, la convergencia condicionada no significa que la serie de red no

converge, solo implica que se requiere de un mayor analizar. De hecho se puede usar el método de Ewald deducir un expresión de la función Green cuasi-periódica de Helmholtz en términos de dos representaciones de series exponencialmente convergentes, comprobando así la convergencia absoluta de la función.

3.5.2.2. Método de Ewald

Basándose en la generalización de la función Zeta de Riemann estudiada por Epstein en 1902, la cual el propio autor denominó función Zeta de Epstein, en 1921 Ewald [40] introdujo una técnica que revolucionó el estudio de la electrostática en cristales. Dada una suma $\sum_{\Lambda} \Phi(\vec{R}_{\mathbf{n}})$ que priori converge lentamente, la reescribimos como $\sum_{\Lambda} \Phi(\vec{R}_{\mathbf{m}})F(\vec{R}_{\mathbf{m}}) + \sum_{\Lambda} \Phi(\vec{R}_{\mathbf{m}})(1 - F(\vec{R}_{\mathbf{m}}))$, donde la función F , a veces denominado potencial de apantallamiento, se elige de modo que $F(\vec{R}_{\mathbf{m}})$ tienda rápidamente a cero cuando $|\vec{R}_{\mathbf{m}}| \rightarrow \infty$ para que la primera suma se pueda calcular fácilmente. La segunda suma aún converge lentamente, pero una aplicación de la fórmula de suma de Poisson dará como resultado una suma sobre la red recíproca que implica la transformada de Fourier de $\Phi(\cdot)(1 - F(\cdot))$, que (siempre que F sea lo suficientemente suave) volverá a converger rápidamente. Es importante enfatizar que la necesidad de poder calcular esta transformada de Fourier restringe las opciones posibles para F . Más aún, en el enfoque estándar, la función F no se elige desde el principio; en su lugar comenzamos con la representación integral de la función de Green en el espacio libre, que permite realizar la descomposición en dos series dividiendo el contorno de integración Γ en dos: $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, donde Γ_2 coincide con el eje real para η a ∞ , siendo $\eta > 0$ una constante positiva arbitraria. De hecho, la suma de Ewald conduce a una familia de representaciones de un parámetro con las series espacial y dual correspondientes a los límites $\eta \rightarrow 0$ y $\eta \rightarrow \infty$, respectivamente.

En este trabajo, se usó el procedimiento desarrollado en las referencias [41], [42] y [44] para abordar el análisis de la suma de red de los dipolos inducidos. Para esto, partimos de la versión integral:

$$G_k(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} = -\frac{1}{2}\pi^{-d/2} \int_{\Gamma} e^{-|\vec{r}-\vec{r}'|^2 t^2} e^{k^2/4t^2} t^{d-3} dt,$$

Esta representación integral está basada en una de las versiones de la función Zeta de Epstein, por lo que es importante remarcar que cuando usamos esta integral asumimos que la parte imaginaria de k es positiva y de magnitud muy pequeña, como es el caso con el que hemos estado trabajando (Figura 3.9). De esta manera se puede considerar el límite cuando esta tiende a cero al final. Sustituyendo esta representación integral en la función de Green cuasi-periódica se observa que:

$$\begin{aligned} G_{\Lambda}^{(i)}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{R}_{\mathbf{n}} \in \Lambda} \exp\left(i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_{\mathbf{n}}\right) \left[-\frac{1}{2\pi^{3/2}} \int_{\Gamma^{(i)}} \exp\left(-|\vec{r}-\vec{R}_{\mathbf{n}}|^2 t^2 + \frac{k^2}{4t^2}\right) dt \right] \\ &= -\frac{1}{2\pi^{3/2}} \int_{\Gamma^{(i)}} \exp\left(\frac{k^2}{4t^2}\right) \sum_{\vec{R}_{\mathbf{n}} \in \Lambda} \exp\left(-|\vec{r}-\vec{R}_{\mathbf{n}}|^2 t^2 + i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_{\mathbf{n}}\right) dt, \end{aligned} \quad (3.91)$$

donde $\Gamma^{(i)}$ hace referencia a los segmentos de contorno antes mencionados. Con base en la expresión (3.91) es posible demostrar que $G_{\Lambda}^{(1)}$ y $G_{\Lambda}^{(2)}$ tienen tasas de convergencia exponencial de $\exp(-K_{\mathbf{n}}^2/4\eta^2)$ y $\exp(-R_{\mathbf{n}}^2/4\eta^2)$, respectivamente, aumentando así el parámetro η mejora la convergencia de $G_{\Lambda}^{(2)}$ pero hace que la de $G_{\Lambda}^{(1)}$ se deteriore. En las aplicaciones, es necesario buscar una opción óptima para η que equilibre estas tasas adecuadamente [42].

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

Para observar explícitamente la convergencia exponencial, podemos observar que la expresión en (3.91) es rápidamente convergente cuando t es grande. De esta última observación es evidente la necesidad de proponer la división del contorno de integración en dos intervalos de análisis. En particular, para una convergencia en casos en que t es menor se propone reescribir la suma en el espacio recíproco usando la fórmula de suma de Poisson, de manera análoga al caso que se estudió en la sección (3.5.2.1). Entonces, usando la descripción del vector de posición $\vec{r} = \vec{r}^{\parallel} + \vec{r}^{\perp}$, reescribimos a la función de Green cuasi-periódica $G_{\Lambda}^{(1)}$ de la forma:

$$G_{\Lambda}^{(1)} = -\frac{1}{2\pi^{3/2}} \int_{\Gamma^{(i)}} \exp\left(\frac{k^2}{4t^2} - |\vec{r}^{\perp}|^2 t^2\right) \sum_{\vec{R}_{\mathbf{n}} \in \Lambda} \exp\left(-|\vec{r}^{\parallel} - \vec{R}_{\mathbf{n}}|^2 t^2 + i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_{\mathbf{n}}\right) dt.$$

La expresión anterior se puede reescribir usando la fórmula de suma de Poisson dada por (3.76) para el caso en que $f(\vec{r}) = \exp(i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{r}) \exp(-|\vec{r}^{\parallel} - \vec{r}^{\parallel}|^2 t^2)$, el cual coincide con el resultado de el Teorema de Krazer y Pryme de (1893), el cual se enuncia a continuación y cuya demostración se consultó de la referencia [44].

Teorema de Krazer y Prym

Conservando la notación de vectores de red $\vec{R}_{\mathbf{n}}$ y dimensión de celda unitaria \mathcal{A} . Sean \vec{K} y \vec{r} dos vectores arbitrarios, entonces:

$$\begin{aligned} S_{\vec{K}}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{R}_{\mathbf{n}} \in \Lambda} \exp\left[-t^2 |\vec{R}_{\mathbf{n}} - \vec{r}|^2 + i\vec{K} \cdot (\vec{R}_{\mathbf{n}} - \vec{r})\right] \\ &= \frac{1}{\mathcal{A}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{t}\right)^{d_{\Lambda}} \sum_{\vec{K}_{\mathbf{m}} \in \Lambda^*} \exp\left[-\frac{|\vec{K} + \vec{K}_{\mathbf{m}}|^2}{4t^2} + i\vec{K}_{\mathbf{m}} \cdot \vec{r}\right] \end{aligned} \quad (3.92)$$

De esta manera, usando el Teorema se puede reescribir la función de Green cuasi-periódica $G_{\Lambda}^{(1)}$ de la forma:

$$\begin{aligned} G_{\Lambda}^{(1)}(\vec{r}) &= -\frac{1}{2\pi^{3/2}} \int_0^{\eta} \exp\left(\frac{k^2}{4t^2} - |\vec{r}^{\perp}|^2 t^2 + i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{r}^{\parallel}\right) \\ &\quad \times \left[\frac{1}{\mathcal{A}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{t}\right)^2 \sum_{\vec{K}_{\mathbf{m}} \in \Lambda^*} \exp\left(-\frac{|\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}|^2}{4t^2} + i\vec{K}_{\mathbf{m}} \cdot \vec{r}^{\parallel}\right) \right] dt \\ &= -\frac{1}{2\pi^{1/2}} \frac{1}{\mathcal{A}} \sum_{\vec{K}_{\mathbf{m}} \in \Lambda^*} \exp\left(i(\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}) \cdot \vec{r}^{\parallel}\right) \int_0^{\eta} \exp\left(\frac{k^2 - |\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}|^2}{4t^2} - |\vec{r}^{\perp}|^2 t^2\right) t^{-2} dt. \end{aligned}$$

Así, considerando el cambio de variable $t = 1/\zeta$ se reescribe la integral de la forma:

$$G_{\Lambda}^{(1)}(\vec{r}) = -\frac{1}{2\pi^{1/2}} \frac{1}{\mathcal{A}} \sum_{\vec{K}_{\mathbf{m}} \in \Lambda^*} \exp\left(i(\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}) \cdot \vec{r}^{\parallel}\right) \int_{1/\eta}^{\infty} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{4} |\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}} - k|^2 - \frac{|\vec{r}^{\perp}|^2}{\zeta^2}\right) d\zeta. \quad (3.93)$$

Por otra parte, la función de Green cuasi-periódica $G_{\Lambda}^{(2)}$ se extrae directamente de la expresión

(3.91), de donde se obtiene que explícitamente está dada por:

$$G_{\Lambda}^{(2)}(\vec{r}) = -\frac{1}{2\pi^{3/2}} \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} \exp(i\vec{K}_{||} \cdot \vec{R}_n) \int_{\eta}^{\infty} \exp\left(-|\vec{r} - \vec{R}_n|^2 t^2 + \frac{k^2}{4t^2}\right) dt. \quad (3.94)$$

Las expresiones (3.93) y (3.94) se pueden simplificar usando la definición de la función error (erf) y la función de error complementaria (erfc), las cuales, de acuerdo con la referencia [45], están definidas por:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt \quad ; \quad \operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-t^2} dt = 1 - \operatorname{erf}(z).$$

Con base en dichas definiciones, en esta misma referencia, se obtiene la siguientes relaciones:

$$\int \exp\left(-a^2 t^2 - \frac{b^2}{t^2}\right) dt = \frac{\sqrt{\pi}}{4a} \left[e^{2ab} \operatorname{erf}\left(at + \frac{b}{t}\right) + e^{-2ab} \operatorname{erf}\left(at - \frac{b}{t}\right) \right] + \text{const} \quad (3.95)$$

$$\int \exp\left(-a^2 t^2 + \frac{b^2}{t^2}\right) dt = -\frac{\sqrt{\pi}}{4a} \exp\left(-a^2 t^2 + \frac{b^2}{t^2}\right) \left[w\left(\frac{b}{t} + iat\right) + w\left(-\frac{b}{t} + iat\right) \right] + \text{const} \quad (3.96)$$

para ($a \neq 0$) y con $w(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz)$. De esta manera, identificando $a^2 = (|\vec{K}_{||} + \vec{K}_m|^2 - k^2)/4 \rightarrow a = k\gamma_m/2$ y $b^2 = |\vec{r}^{\perp}|$ para el primer caso, la función de Green cuasi-periódica $G_{\Lambda}^{(1)}$ se puede reescribir de la forma:

$$G_{\Lambda}^{(1)}(\vec{r}) = - \sum_{\vec{K}_m \in \Lambda^*} \frac{e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}^{\parallel}}}{4k\mathcal{A}\gamma_m} \left\{ e^{k\gamma_m|\vec{r}^{\perp}|} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_m}{2\eta} + |\vec{r}^{\perp}|\eta\right) + e^{-k\gamma_m|\vec{r}^{\perp}|} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_m}{2\eta} - |\vec{r}^{\perp}|\eta\right) \right\}, \quad (3.97)$$

donde γ_m está definida por (3.88) y $\vec{k}_m = \vec{K}_{||} + \vec{K}_m$, coincidiendo con la notación propuesta en la sección 3.5.2.1. Mientras que para el segundo caso, identificando $a^2 = |\vec{r} - \vec{R}_n|^2 = \rho_n^2$ y $b^2 = k^2/4$, la función de green cuasi-periódica $G_{\Lambda}^{(2)}$ se puede reescribir de la forma:

$$G_{\Lambda}^{(2)}(\vec{r}) = - \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} \frac{e^{i\vec{K}_{||} \cdot \vec{R}_n}}{8\pi\rho_n} \left\{ e^{ik\rho_n} \operatorname{erfc}\left(\rho_n\eta + \frac{ik}{2\eta}\right) + e^{-ik\rho_n} \operatorname{erfc}\left(\rho_n\eta - \frac{ik}{2\eta}\right) \right\}, \quad (3.98)$$

La convergencia exponencial de (3.97) y (3.98) se sigue de la expansión asintótica de la función de error complementaria dada por $\sqrt{\pi}\operatorname{erfc}(z) \sim \exp(-z^2)$ [42]. Subsiguiente, en este punto del estudio, se puede realizar un análisis de convergencia para las funciones de Green cuasi-periódica en términos de la expresión usada para su cálculo (suma real, suma dual o suma de Ewald). Con base en el análisis se demostrará la utilidad del Método de Ewald para el cálculo de la suma reticular en (3.80).

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

3.5.2.3. Análisis de convergencia de la función de Green cuasi-periódica

Un aspecto importante del análisis que se debe retomar consiste en comparar la convergencia de las diferentes versiones de la función de Green cuasi-periódica usadas para el cálculo, ya que, como se había señalado previamente, la representación real y dual de la función son condicionalmente convergente para el caso en que $|\vec{r}^\perp| \rightarrow 0$, es decir, el caso en que se evalúa la suma en el plano del cristal, que es de nuestro interés. En consecuencia, para realizar el análisis es conveniente extraer las principales expresiones obtenidas a lo largo del análisis de la función de Green cuasi-periódica, las cuales se resumen en la tabla 3.1.

(3.80): $\overset{\leftarrow}{\mathcal{G}}_{\nu\mu} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{0}_\Lambda} \left\{ \left(k^2 \overset{\leftarrow}{I} + \nabla \otimes \nabla \right) \left[G_\Lambda(\vec{r} - \vec{r}_{\nu\mu}; \vec{K}_{ }) - \delta_{\nu\mu} G_{\vec{0}_\Lambda}(\vec{r} - \vec{r}_{\nu\mu}) \right] \right\}$	
Suma real	(3.81): $G_\Lambda(\vec{r}; \vec{K}_{ }) = \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} G_k(\vec{r}, \vec{R}_n) e^{i\vec{K}_{ } \cdot \vec{R}_n}$
Suma dual	(3.87): $G_\Lambda(\vec{r}; \vec{\kappa}_m) = -\frac{1}{2A} \sum_{\vec{K}_m \in \Lambda^*} (k\gamma)_n^{-1} e^{i\vec{\kappa}_m \cdot \vec{r}^\perp} e^{-k\gamma_n \vec{r}^\perp }$
Suma Ewald	$G_\lambda(\vec{r}; \vec{K}_{ }) = G_\lambda^{(1)}(\vec{r}; \vec{K}_{ }, \eta) + G_\lambda^{(2)}(\vec{r}; \vec{K}_{ }, \eta)$ (3.97): $G_\Lambda^{(1)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4A} \sum_{\vec{K}_m \in \Lambda^*} \frac{e^{i\vec{\kappa}_m \cdot \vec{r}^\perp}}{k\gamma_m} \left\{ e^{k\gamma_m \vec{r}^\perp } \operatorname{erfc} \left(\frac{k\gamma_m}{2\eta} + \vec{r}^\perp \eta \right) + e^{-k\gamma_m \vec{r}^\perp } \operatorname{erfc} \left(\frac{k\gamma_m}{2\eta} - \vec{r}^\perp \eta \right) \right\}$ (3.98): $G_\Lambda^{(2)}(\vec{r}) = -\frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{R}_n \in \Lambda} \frac{e^{i\vec{K}_{ } \cdot \vec{R}_n}}{\rho_n} \left\{ e^{ik\rho_n} \operatorname{erfc} \left(\rho_n \eta + \frac{ik}{2\eta} \right) + e^{-ik\rho_n} \operatorname{erfc} \left(\rho_n \eta - \frac{ik}{2\eta} \right) \right\}$
donde:	$\vec{\rho}_n = \vec{r} - \vec{R}_n \quad , \quad \vec{\kappa}_m = \vec{K}_{ } + \vec{K}_m; \quad \gamma_m = \begin{cases} \frac{1}{k} \sqrt{\kappa_m^2 - k^2} & \text{si } k \leq \kappa_m \\ -\frac{i}{k} \sqrt{k^2 - \kappa_m^2} & \text{si } \kappa_m < k \end{cases}$

Tabla 3.1: Diferentes versiones de la función de Green cuasi-periódica

Ahora bien, es importante observar que la suma reticular se evalúa en los vector $\vec{r}_{\nu\mu} = \vec{r}_\nu - \vec{r}_\mu$, es decir, con respecto a la posición de los vectores base y, considerando que dichos vectores están contenidos dentro de la celda unitaria, se deduce que el análisis de la función de Green cuasi-periódica se restringe al rango $\vec{r}_{\nu\mu} \cdot \hat{a}_i < |\vec{a}_i|$, donde el subíndice i hace referencia al i -ésimo vector de red. Consecuentemente, con el fin de visualizar la importancia de la representación elegida, particularmente, podemos calcular el caso límite en que $\vec{r}_{\nu\mu} = \vec{0}$, el cual también se puede interpretar como el caso en que el cristal plasmónico solo cuenta con una partícula en la celda unitaria. No obstante, es importante remarcar que el análisis del caso propuesto solo puede ser considerado como un resultado auxiliar, ya que, como se ha remarcado anteriormente, la resolución del momento dipolar requiere de la aplicación de operadores diferenciales sobre la función escalar de Green y, por lo tanto, para ser consistente con el formalismo matemático, es necesario el cálculo de las derivadas antes de cualquier evaluación en valores numéricos específicos.

Sin embargo, como se retomará posteriormente, el análisis del caso $\vec{r}_{\nu\mu} = \vec{0}$, al nivel de funciones escalar, ayudará en el análisis de convergencia del caso multidimensional a nivel de función de Green diádica, razón por la que procederemos al análisis de dicho caso límite. Consecuentemente, evaluando las expresiones de la tabla 3.1 para el valor $\vec{r} = \vec{0}$, se obtiene los resultados resumidos en la tabla 3.2.

Suma real:	$G_{\Lambda}(\vec{0}; \vec{K}_{\parallel}) = \sum_{\vec{R}_{\mathbf{n}} \in \Lambda} \vec{R}_{\mathbf{n}} ^{-1} e^{ik \vec{R}_{\mathbf{n}} + i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_{\mathbf{n}}}$
Suma dual:	$G_{\Lambda}(\vec{0}; \vec{K}_{\mathbf{m}}) = -\frac{1}{2A} \sum_{\vec{K}_{\mathbf{m}} \in \Lambda^*} [k\gamma_{\mathbf{m}}]^{-1}$
Suma Ewald	$G_{\Lambda}(\vec{0}; \vec{K}_{\parallel}) = -\frac{1}{2A} \sum_{\vec{K}_{\mathbf{m}} \in \Lambda^*} [k\gamma_{\mathbf{m}}]^{-1} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta}\right)$ $-\frac{1}{4\pi} \sum_{\vec{R}_{\mathbf{n}} \in \Lambda} \vec{R}_{\mathbf{n}} ^{-1} e^{i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_{\mathbf{n}}} \left\{ e^{ik \vec{R}_{\mathbf{n}} } \operatorname{erfc}\left(\vec{R}_{\mathbf{n}} \eta + \frac{ik}{2\eta}\right) \right.$ $\left. e^{-ik \vec{R}_{\mathbf{n}} } \operatorname{erfc}\left(\vec{R}_{\mathbf{n}} \eta - \frac{ik}{2\eta}\right) \right\}$

Tabla 3.2: Función de Green cuasi-periódica evaluada en el caso límite $\vec{r} = \vec{0}$

De las expresiones en la tabla 3.2, se observa que la suma de Ewald reproduce las sumas de las representaciones real y dual ponderadas por expresiones en términos de la función $\operatorname{erfc}(z)$, donde el argumento de dicha función depende de manera diferente para cada una de las dos contribuciones en la suma de Ewald. Más todavía, es fundamental contemplar la dependencia con respecto al parámetro de Ewald η en cada una de las expresiones, ya que al aparecer en ambas expresiones provoca que la convergencia de las dos contribuciones sean acopladas entre si. Para visualizar la dependencia en términos del parámetro η , proponemos analizar las funciones:

$$F_{Ewald}^{Dual}(z; \eta) = \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{2\eta}\right) \quad ; \quad F_{Ewald}^{Real}(z; \eta) = e^{ikz} \operatorname{erfc}\left(z\eta + \frac{ik}{2\eta}\right) + e^{-ikz} \operatorname{erfc}\left(z\eta - \frac{ik}{2\eta}\right)$$

las cuales representan la función de peso de la contribución dual y real en la suma de Ewald, respectivamente. Consecuentemente, en la Figura 3.16 se muestra las gráficas de las funciones $F_{Ewald}^{Dual}(z)$ y $F_{Ewald}^{Real}(z)$ en función de $|\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}| \sim k\gamma_{\mathbf{m}}$ y $|\vec{R}_{\mathbf{n}}|$, los cuales corresponden a los diferentes términos de las sumas, respectivamente. Dado que la evaluación de la función $\operatorname{erfc}(z)$ arroja valores en el campo de los complejos, en la Figura 3.16 se grafica la parte real (línea continua) y la parte imaginaria (línea punteada) de la función. Particularmente, se observa que al tener la suma de los términos alternantes de signo $e^{\pm ikz} \operatorname{erfc}\left(z\eta \pm \frac{ik}{2\eta}\right)$ produce que la evaluación de la función F_{Ewald}^{Real} (línea azul rey) quede contenido en valores reales que tiende a cero para valores mayores de $|\vec{R}_{\mathbf{n}}|$. Por otra parte, en la evaluación de F_{Ewald}^{Dual} , se hace explícito el análisis por casos requerido por $k\gamma_{\mathbf{m}}$, el cual depende de la relación que existe entre la norma de la suma de los vectores en el plano del cristal, $|\vec{K}_{\parallel}|$ y $|\vec{K}_{\mathbf{m}}|$, y la magnitud del vector de onda incidente k . Como se representa gráficamente, al considerar el caso $|\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}| < k$ (línea roja) el argumento de la función F_{Ewald}^{Dual} será puramente imaginario y por lo tanto la evaluación de la función arrojará valores con parte real igual a 1 y parte imaginaria tendiendo a cero conforme nos acerquemos al 0; mientras que por otra parte, al considerar $|\vec{K}_{\parallel} + \vec{K}_{\mathbf{m}}| > k$ (línea anaranjada) el argumento de

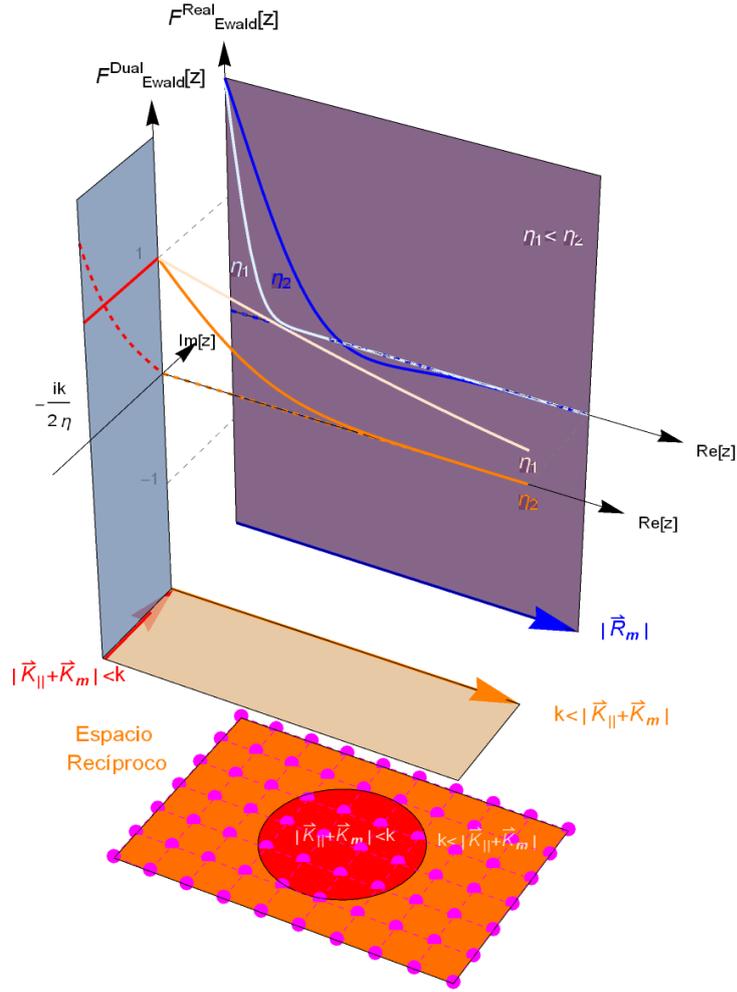


Figura 3.16: Análisis de la función $\text{erfc}(z)$ inmiscuida en la expresión de la suma de Ewald

la función será puramente real y por lo tanto parte imaginaria de la evaluación de la función es nula, mientras que las parte real tiende a cero para argumentos mayores. Por lo tanto, del análisis anterior, se demuestra que las funciones de ponderación derivadas del método de Ewald inducen la convergencia de las sumas en $G_{\Lambda}^{(1)}$ y $G_{\Lambda}^{(2)}$ de manera simultánea, produciendo a su vez la convergencia total de la suma de Ewald.

No obstante, es importante remarcar que la convergencia simultánea dependerá fuertemente de la elección del parámetro η ya que, como se mencionó previamente, la dependencia de los argumentos de las funciones F_{Ewald}^{Dual} y F_{Ewald}^{Real} produce un acoplamiento de convergencia entre las mismas. De esta manera, con el propósito de visualizar la importancia del acoplamiento de la dependencia con respecto al parámetro η , en la Figura 3.16 se grafican las funciones de ponderación para dos parámetros η_1 y η_2 , de tal manera que $\eta_1 < \eta_2$. Como se observa, una elección del parámetro menor (η_1 : líneas de color claro) hace que el valor de la función F_{Ewald}^{Real} tienda más rápido a cero, pero se ensancha la convergencia a cero de la función F_{Ewald}^{Dual} , por lo que se puede despreciar la contribución de términos de orden mayor a la suma real $G_{\Lambda}^{(2)}$ y, de manera inversa, se obtiene una mayor contribución de términos a la suma dual $G_{\Lambda}^{(1)}$.

Para simplificar el análisis asociado a la elección del parámetro η contemplando la convergencia acoplada de las funciones de ponderación, se propone la descripción de los parámetros $|\vec{R}_n|$, $|\vec{K}_m|$ k y η en términos del parámetro de red L , lo cual se justifica debido a que los valores de las funciones considerados en la suma se encuentran en términos de múltiplos del parámetro al correr los enteros \mathbf{n} y \mathbf{m} . De tal manera que definimos las relaciones

$$|\vec{R}_n| = p * L \quad , \quad |\vec{K}_m| = \frac{2\pi}{p * L} \quad , \quad k = \frac{2\pi}{m * L} \quad , \quad \eta = \frac{\sqrt{\pi}}{n * L} \quad , \quad (3.99)$$

donde p representa de alguna manera al orden \mathbf{n} y \mathbf{m} , respectivamente, m es el número de veces que cabe el parámetro de red L en la longitud de onda de la luz incidente; y n es un parámetro que debe elegirse para definir la elección del parámetro η . Posteriormente, sustituyendo las relaciones propuestas, se obtienen expresiones de las funciones de ponderación en términos de los valores p , m y n . Con base en lo anterior, en la Figura 3.17 se grafica la dependencia de las funciones F_{Ewald}^{Dual} y F_{Ewald}^{Real} de m y n para diferentes ordenes (valores de p), donde se consideró el caso en que $\vec{K}_{||}$ es paralelo a \vec{K}_m y $|\vec{K}_{||}| = k$ (máxima proyección) para simplificar las expresiones en el caso dual. En las diferentes figuras, se observa que una elección de un parámetro η produce que el valor de la función de ponderación disminuya al considerar una mayor diferencia entre el parámetro de red y la longitud de onda incidente, es decir, un mayor valor del parámetro m .

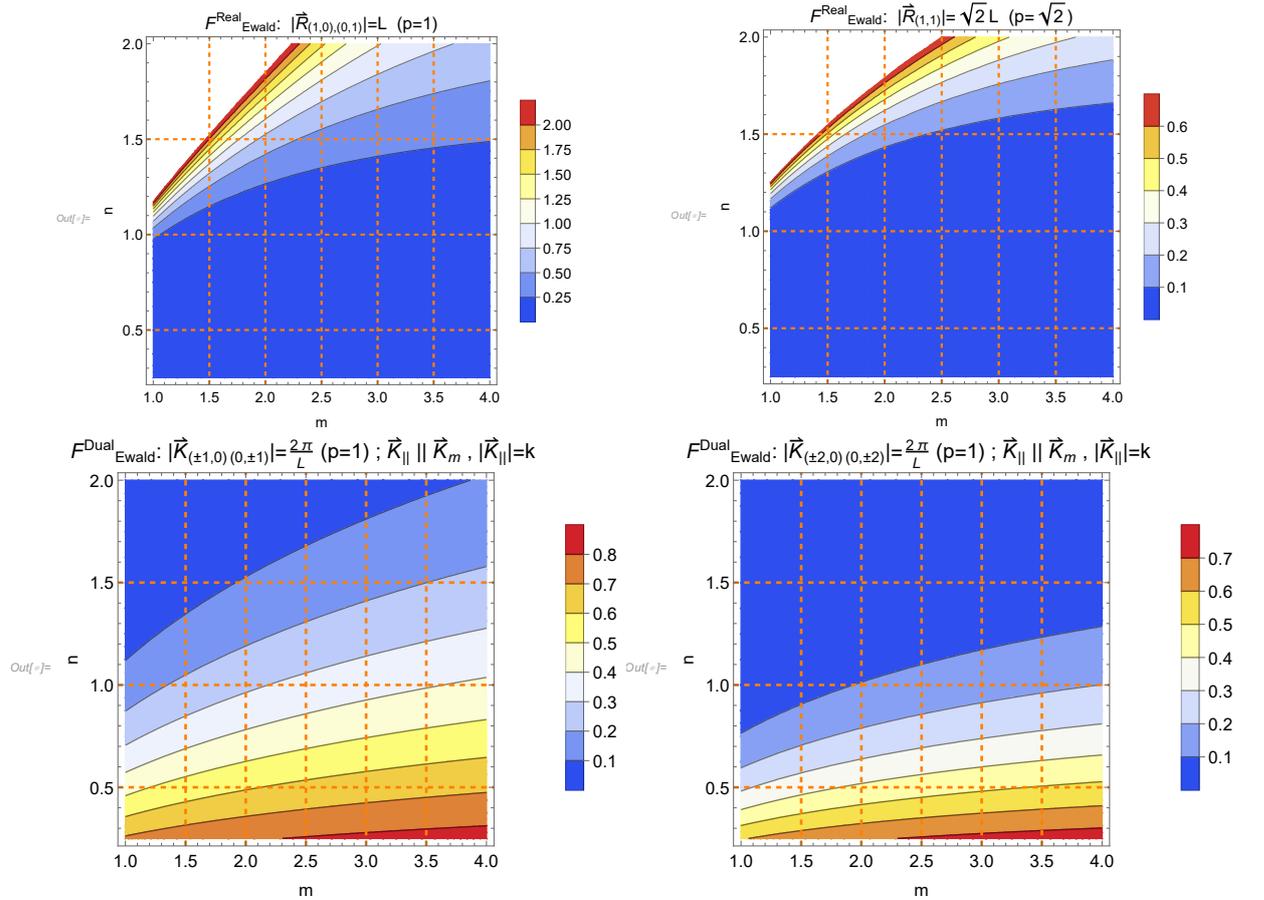


Figura 3.17: Análisis de la parte real de las funciones de ponderación en términos de los parámetros p , n y m de las expresiones (3.99).

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

En particular, dado que en este caso nos interesa el estudio de la respuesta óptica, es decir, la respuesta dentro del espectro visible, podemos considerar que la longitud de onda incidente se encuentra en un rango de 400 nm a 800 nm, el cual corresponde a un rango accesible para ser medido usando un espectrómetro comercial común. Ahora bien, como ejemplo de interés, al estudiar un cristal plasmónico de 200 nm de parámetro de red en el límite de longitud de incidente de 800 nm se tiene el caso en el que $m = 4$. De esta manera, de acuerdo a la tendencias de las gráficas de la Figura 3.17, para obtener una contribución de la suma real y dual, así como convergencia en ambos términos, es recomendable elegir parámetros n pequeños. Particularmente, si elegimos el caso en que $n = 1$ se observa una contribución mínima de los primeros ordenes de la parte real, es decir, una rápida convergencia de la contribución real, y por otra parte una contribución de hasta el segundo orden en la contribución dual. Ahora bien, considerando que experimentalmente en los espectro de extinción (consultar referencia [17]) se observan contribuciones de difracciones de primer orden a lo más, en este trabajo usamos el parámetro $n = 1$, lo cual implica la elección del parámetro de Ewald de $\eta = \frac{\sqrt{\pi}}{L}$.

Por lo tanto, una vez que ya se ha estudiado la convergencia de la función de Green cuasi-periódica (nivel escalar), podemos elevar el análisis a la suma reticular (nivel diádico).

3.5.3. Cálculo del campo esparcido por el arreglo

Como se mencionó previamente, es importante siempre tener en mente que este la resolución de la función de Green cuasi-periódica no es el resultado final, ya que debe ser sustituido en la expresión (3.80) y, posteriormente, la expresión resultante debe ser sustituida en la ecuación (3.79) para poder calcular la suma reticular. Consecuentemente, también es importante observar que en estos últimos puntos es necesario calcular derivadas parciales de las funciones de Green cuasi-periódica para el cálculo de la función de Green diádica; y, más aún, posterior al cálculo de la diada, es necesario calcular el límite cuando $\vec{r} \rightarrow 0$ para construir los elementos de la polarizabilidad efectiva $[\mathbb{M}]_{\nu\mu}$ cuando $\mu = \nu$ en la expresión (3.66).

Para proceder a calcular las derivadas correspondientes, se puede observar que en la función de Green cuasi-periódica $G_{\Lambda}^{(1)}$ se puede interpretar como una función en coordenadas cilíndricas de la forma $e^{i\vec{\kappa}_{\mathbf{n}} \cdot \vec{r}^{\parallel}} g(z)$ (con $|z| = |\vec{r}^{\perp}|$), mientras que la función de Green cuasi-periódica $G_{\Lambda}^{(2)}$ se puede interpretar como una composición de funciones de la forma $F(\rho(\vec{r}))$ (con $\rho(\vec{r}) = \rho_{\mathbf{n}}$). Así, al calcular la aplicación de operador diferencial en función del sistema de coordenadas, se obtiene:

$$\begin{aligned} \left(\overleftarrow{I} k^2 + \nabla \otimes \nabla \right) e^{i\vec{\kappa}_{\mathbf{n}} \cdot \vec{r}^{\parallel}} g(z) &= \begin{pmatrix} k^2 - \kappa_{\mathbf{n},x}^2 & -\kappa_{\mathbf{n},x} \kappa_{\mathbf{n},y} & 0 \\ -\kappa_{\mathbf{n},x} \kappa_{\mathbf{n},y} & k^2 - \kappa_{\mathbf{n},y}^2 & 0 \\ 0 & 0 & k^2 \end{pmatrix} e^{i\vec{\kappa}_{\mathbf{n}} \cdot \vec{r}^{\parallel}} g(z) \\ &+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & i\kappa_{\mathbf{n},x} \\ 0 & 0 & i\kappa_{\mathbf{n},y} \\ i\kappa_{\mathbf{n},x} & i\kappa_{\mathbf{n},y} & 0 \end{pmatrix} e^{i\vec{\kappa}_{\mathbf{n}} \cdot \vec{r}^{\parallel}} \frac{dg(z)}{dz} \\ &+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} e^{i\vec{\kappa}_{\mathbf{n}} \cdot \vec{r}^{\parallel}} \frac{d^2 g(z)}{dz^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\overleftarrow{I} k^2 + \nabla \otimes \nabla) F[\rho(\vec{r})] &= \overleftarrow{I} \left[k^2 F(\rho_{\mathbf{n}}) + \frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_{\mathbf{n}}} \right] \\
 &+ \begin{pmatrix} \rho_{\mathbf{n},x}^2 & \rho_{\mathbf{n},x} \rho_{\mathbf{n},y} & \rho_{\mathbf{n},x} \rho_{\mathbf{n},z} \\ \rho_{\mathbf{n},y} \rho_{\mathbf{n},x} & \rho_{\mathbf{n},y}^2 & \rho_{\mathbf{n},y} \rho_{\mathbf{n},z} \\ \rho_{\mathbf{n},z} \rho_{\mathbf{n},x} & \rho_{\mathbf{n},z} \rho_{\mathbf{n},y} & \rho_{\mathbf{n},z}^2 \end{pmatrix} \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} \right) \right]_{\rho=\rho_{\mathbf{n}}},
 \end{aligned}$$

donde $\kappa_{\mathbf{n},x_i}$ y $\rho_{\mathbf{n},x_i}$ representan la componente i -ésima del vector $\vec{\kappa}_{\mathbf{n}} = \vec{K}_{||} + \vec{K}_{\mathbf{n}}$ y $\vec{\rho}_{\mathbf{n}} = \vec{r} - \vec{R}_{\mathbf{n}}$, respectivamente. Por otra parte, se observa que el problema se resume a calcular las derivadas de las funciones escalares $g(z)$ y $F(r)$, las cuales se enlistan a continuación.

- $g(z) = e^{k\gamma_{\mathbf{m}}|z|} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta} + \eta|z|\right) + e^{-k\gamma_{\mathbf{m}}|z|} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta} - \eta|z|\right)$
- $\frac{dg(z)}{dz} = k\gamma_{\mathbf{m}} \operatorname{sgn}(z) \left\{ e^{k\gamma_{\mathbf{m}}|z|} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta} + \eta|z|\right) - e^{-k\gamma_{\mathbf{m}}|z|} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta} - \eta|z|\right) \right\}$
- $\frac{d^2g(z)}{dz^2} = (k\gamma_{\mathbf{m}})^2 \left\{ e^{k\gamma_{\mathbf{m}}|z|} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta} + \eta|z|\right) + e^{-k\gamma_{\mathbf{m}}|z|} \operatorname{erfc}\left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta} - \eta|z|\right) \right\} + \frac{4\eta}{\sqrt{\pi}} k\gamma_{\mathbf{m}} \exp\left[-\frac{(k\gamma_{\mathbf{m}})^2}{4\eta^2} - \eta^2|z|^2\right]$
- $F(\rho) = \frac{1}{\rho} \left\{ e^{ik\rho} \operatorname{erfc}\left(\eta\rho + \frac{ik}{2\eta}\right) + e^{-ik\rho} \operatorname{erfc}\left(\eta\rho - \frac{ik}{2\eta}\right) \right\}$
- $\frac{1}{\rho} \frac{dF(\rho)}{d\rho} = \frac{1}{\rho^3} \left\{ (-1 + ik\rho) e^{ik\rho} \operatorname{erfc}\left(\eta\rho + \frac{ik}{2\eta}\right) + (-1 - ik\rho) e^{-ik\rho} \operatorname{erfc}\left(\eta\rho - \frac{ik}{2\eta}\right) + \frac{4\eta}{\sqrt{\pi}} \rho \exp\left[\frac{k^2}{4\eta^2} - \eta^2\rho^2\right] \right\}$
- $\frac{1}{\rho} \left[\frac{1}{\rho} \frac{dF(\rho)}{d\rho} \right] = \frac{1}{\rho^5} \left\{ (3 - 3ik\rho - k^2\rho^2) e^{ik\rho} \operatorname{erfc}\left(\eta\rho + \frac{ik}{2\eta}\right) + (3 + 3ik\rho - k^2\rho^2) e^{-ik\rho} \operatorname{erfc}\left(\eta\rho - \frac{ik}{2\eta}\right) + \frac{4\eta}{\sqrt{\pi}} \rho(3 + 2\eta^2\rho^2) \exp\left[\frac{k^2}{4\eta^2} - \eta^2\rho^2\right] \right\}$

Estos resultados se deben sustituir dentro de las expresiones (3.97) y (3.98) para calcular la suma de Ewald y, posteriormente, sustituir la suma resultante en la expresión de la suma reticular dada por (3.80), donde es necesario calcular el límite cuando $\vec{r} \rightarrow \vec{0}_{\Lambda}$. Ahora bien, una observación astuta que se puede hacer para simplificar el análisis que resta consiste en darse cuenta que el cálculo del límite para el caso en que $\mu \neq \nu$ no representa ningún desafío, ya que este no involucra singularidades y por lo tanto se reduce a la sustitución de $\vec{r} = \vec{r}_{\nu\mu}$ en (3.80). Consecuentemente, con base en lo anterior, podemos concentrar nuestra atención en la resolución del límite en el caso $\mu = \nu$. Particularmente, este caso ($\vec{r}_{\mu\nu} = \vec{0}_{\Lambda}$) representa un reto cuando $\vec{R}_{\mathbf{0}} = \vec{0}_{\Lambda}$ dentro de la suma real, por lo que, para resolver el límite, se propone extraer dicho término y compararlo con el

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

$\delta_{\nu\mu}G_{\vec{0}_\Lambda}(\vec{r})$. De esta manera, analizando el caso $\vec{R}_0 = \vec{0}_\Lambda = \vec{r}_{\nu\nu} \rightarrow \rho_0 = |\vec{r}|$, se tiene explícitamente:

$$\begin{aligned} \rho_0 = r : & \left\{ \overleftrightarrow{I} \left[k^2 F(r) + \frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} \Big|_{\rho=r} \right] + \vec{r} \otimes \vec{r} \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} \right) \Big|_{\rho=r} \right] \right\} \\ & - 2 \left\{ \overleftrightarrow{I} \left[k^2 + \frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right] - \frac{\vec{r} \otimes \vec{r}}{r^2} \left[k^2 + \frac{3ik}{r} - \frac{3}{r^2} \right] \right\} \frac{e^{ikr}}{r} \\ \Rightarrow & \overleftrightarrow{I} \left\{ k^2 F(r) + \frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} \Big|_{\rho=r} - 2 \left(k^2 + \frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \\ & + \vec{r} \otimes \vec{r} \left\{ \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} \right) \Big|_{\rho=r} \right] + 2 \left(k^2 + \frac{3ik}{r} - \frac{3}{r^2} \right) \frac{e^{ikr}}{r^3} \right\} \end{aligned}$$

Agrupando los términos de los coeficiente de cada tensor por separado, se obtiene:

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{I} : & e^{ikr} \left[2 \left(\frac{1}{r^3} - \frac{ik}{r^2} - \frac{k^2}{r} \right) + \left(-\frac{1}{r^3} + \frac{ik}{r^2} + \frac{k^2}{r} \right) \operatorname{erfc} \left(r\eta + \frac{ik}{2\eta} \right) \right] \\ & + e^{-ikr} \left(-\frac{1}{r^3} - \frac{ik}{r^2} + \frac{k^2}{r} \right) \operatorname{erfc} \left(r\eta - \frac{ik}{2\eta} \right) - \frac{4\eta}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{r^2} e^{-r^2\eta^2 + k^2/4\eta^2} \\ \vec{r} \otimes \vec{r} : & e^{ikr} \left[\frac{1}{r^5} (-k^2 r^2 - 3ikr + 3) \operatorname{erfc} \left(r\eta + \frac{ik}{2\eta} \right) + \frac{2}{r^3} \left(k^2 + \frac{3ik}{r} - \frac{3}{r^2} \right) \right] \\ & e^{-ikr} \left[\frac{1}{r^5} (-k^2 r^2 + 3ikr + 3) \operatorname{erfc} \left(r\eta - \frac{ik}{2\eta} \right) \right] + \frac{2\eta}{\sqrt{\pi} r^5} (4\eta^2 r^3 + 6r) e^{-r^2\eta^2 + k^2/4\eta^2} \end{aligned}$$

Ahora bien, para calcular el límite es conveniente usar las expansiones en serie de Taylos de las funciones exponenciales, es decir:

$$\begin{aligned} e^{\pm ikr} &= 1 \pm \frac{ik}{1!} r - \frac{k^2}{2!} r^2 \mp \frac{ik^3}{3!} r^3 + \frac{k^4}{4!} r^4 + O[r]^5 \\ \operatorname{erfc} \left(r\eta \pm \frac{ik}{2\eta} \right) &= \left[1 \mp i \operatorname{erfi} \left(\frac{k}{2\eta} \right) \right] - \frac{2\eta}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{k^2}{4\eta^2}} r \pm \frac{ik\eta}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{k^2}{4\eta^2}} r^2 + \frac{\eta(k^2 + 2\eta^2)}{3\sqrt{\pi}} e^{\frac{k^2}{4\eta^2}} r^3 \\ &\mp \frac{ik\eta(\eta^2 + 6\eta^2)}{12\sqrt{\pi}} e^{\frac{k^2}{4\eta^2}} r^4 + O[r]^5. \end{aligned}$$

De esta manera, sustituyendo las expansiones en serie en los coeficientes y agrupando los términos de acuerdo a las potencias r^n se observa que:

$$\overleftrightarrow{I} : \frac{4}{3} \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \eta(\eta + k)(\eta - k) e^{\frac{k^2}{4\eta^2}} + k^3 \left[\operatorname{erfi} \left(\frac{k}{2\eta} \right) - i \right] \right\} + O[r]^2 \quad (3.100)$$

$$\vec{r} \otimes \vec{r} : \frac{1}{15\pi} \left\{ -4\eta (k^4 + 2k^2\eta^2 + 12\eta^4) e^{\frac{k^2}{4\eta^2}} + 2\sqrt{\pi} k^5 \left[\operatorname{erfi} \left(\frac{k}{2\eta} \right) - i \right] \right\} + O[r]^2 \quad (3.101)$$

Así, al calcular el límite cuando $r \rightarrow 0$ los términos de orden mayor a 2 y el tensor $\vec{r} \otimes \vec{r}$ se eliminan, por lo que solo se conservan las constantes en las expresiones (3.100). Por lo tanto, resumiendo los resultados anteriores, a este nivel del desarrollo ya somos capaces de calcular la suma reticular $\overleftrightarrow{G}_{\nu\mu}^{\neq}$, el cual es un objeto matemático de 3×3 .

Para la implementación del cálculo de la suma reticular $\overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\nu\mu}^{\neq}$, se desarrolló un código en el Software comercial MATLAB en el cual se ingresan los vectores de red del sistema periódico y los vectores base para calcular los diferentes términos. Particularmente, se calculó la suma reticular para una red con simetría de traslación cuadrada con solo una partícula dentro de la celda unitaria. En la Figura 3.18 se reporta el cálculo para el caso en que $\vec{r}_{\nu\mu} = \vec{0}_{\Lambda}$ en la representación de la suma de Ewald, usando el parámetro $\eta = \frac{\sqrt{\pi}}{L}$; y en la representación de la suma real (3.81), excluyendo el caso $\vec{R}_0 = \vec{0}_{\Lambda}$. El cálculo se realizó considerando una resolución de 0.005 de las cantidades adimensionales L/λ y $K_{\parallel} * L / 2\pi$, tanto para el caso del cálculo con el método de Ewald como para el cálculo con el método directo. Los resultados obtenidos se puede comparar directamente con la Figura 3 de la referencia [46], a partir del cual se corroboran los resultados obtenidos. No obstante, cabe remarcar que debido al alto valor numérico cerca de las difracciones en comparación del resto del mapa, en la Figura 3.18 se reportan las gráficas en escala logarítmica, por lo que se debe asociar los valores negativos a valores en un rango $[0, 1]$ de la escala real.

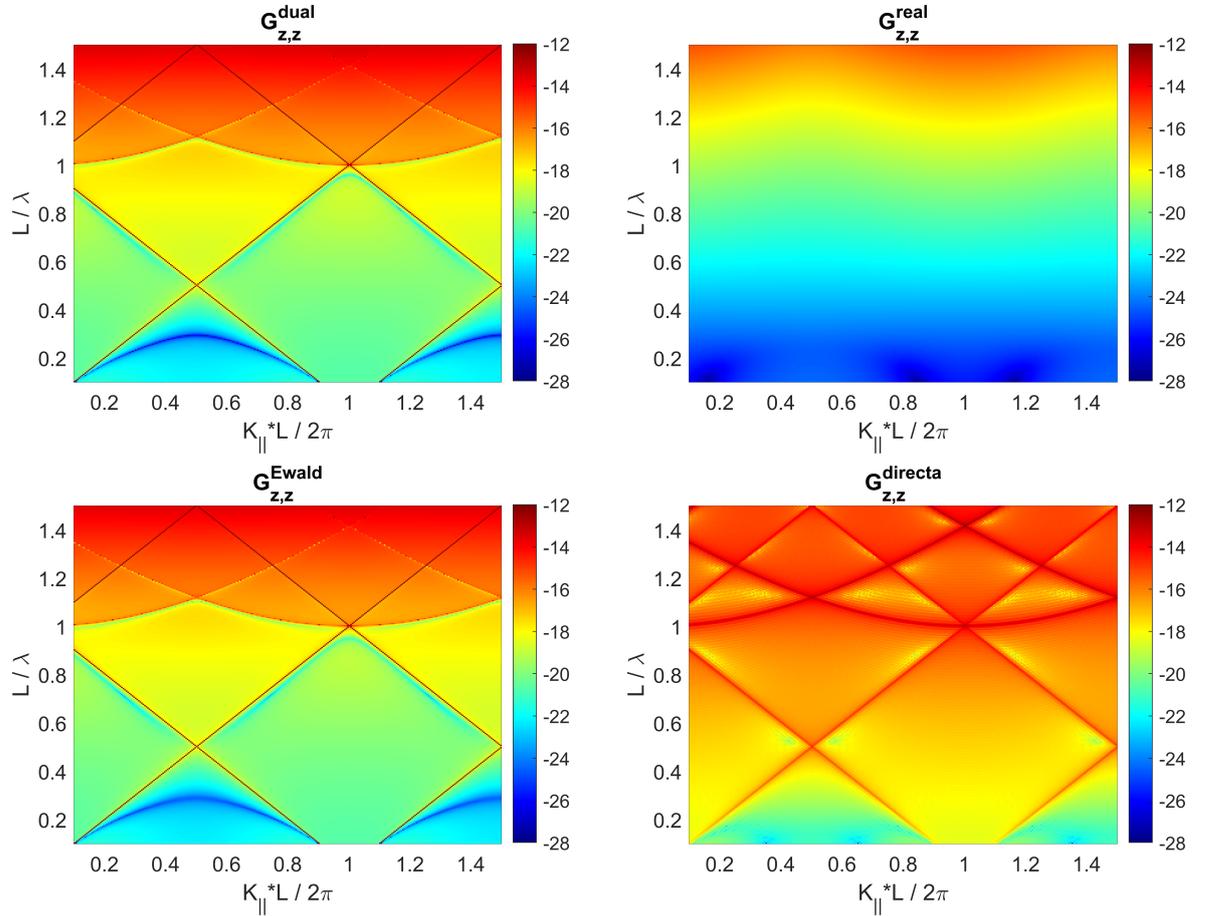


Figura 3.18: Gráficas de la componente z, z de la suma reticular $\overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\nu\nu}^{\neq}$, para el caso en que $\vec{r}_{\nu\mu} = \vec{0}_{\Lambda}$. (sup-izq) contribución dual a la suma de Ewald, (sup-der) contribución real a la suma de Ewald, (inf-izq) suma de Ewald total, (inf-der) suma directa en espacio real.

Para el cálculo de la suma reticular usando el método de Ewald se obtuvo una convergencia de la suma considerando 4 celdas; mientras que el cálculo usando la suma directa en el espacio real requirió de un número de 80 celdas para converger a la gráfica reportada, donde se eligió el

3. MÉTODOS TEÓRICOS EN LA ÓPTICA A LA NANOESCALA

número de celdas para obtener una nitidez comparable a la obtenida con el método de Ewald. Como se mencionó anteriormente, el incremento en el número de celdas requeridas en el cálculo requiere de un mayor tiempo de cómputo, ya que mientras el cálculo de la suma por medio del método de Ewald solo requirió de 50 min de tiempo de cómputo, el cálculo de la suma por medio del método directo requirió de prácticamente 2 días de cómputo. Por consiguiente, la implementación del método de Ewald conlleva una optimización del cálculo. Más aún, es fácil visualizar que el método de Ewald proporciona resultados “suaves”, mientras que la suma directa requiere un gran número de celdas para intentar reproducir dichos resultados.

En síntesis, se comprueba que la convergencia absoluta de la suma de Ewald implica una optimización del modelo sumamente conveniente para la resolución completa de la respuesta óptica de los cristales plasmónicos.

Más aún, cabe remarcar que las expresiones obtenidas en este capítulo permiten implementar el método de dipolos acoplados, de manera consistente, para el estudio de la respuesta óptica de cristales plasmónicos. Razón por la cual a continuación se muestra resumen de las expresiones principales para implementar el método de CDA. Dichas fórmulas se usarán en el siguiente capítulo para estudiar un cristal plasmónico con simetría de traslación hexagonal.

3.5.3.1. Resumen de expresiones analíticas

Respuesta del Arreglo	
Campo Esparcido (3.78):	$\vec{E}_{sc}(\vec{r}) = \frac{i}{4\epsilon\mathcal{A}} \sum_{\nu=1}^N \overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\vec{K}_{ }) \cdot \vec{p}_{\nu} \frac{e^{iK_{ }\cdot\vec{r} + iq_z K_{ } z-z' }}{q_z K_{ }}$
Matriz Campo Lejano (3.75):	$\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\vec{K}_{ }) = k^2 \overleftrightarrow{\mathbf{I}} + \vec{q} \otimes \vec{q}$ $\vec{q} = (\vec{K}_{ }, q_z K_{ }) \quad , \quad q_z K_{ } = \sqrt{k^2 - K_{ }^2}$
Momento Dipolar Inducido	
Dipolos base (3.65):	$\vec{p}_{\nu}(\vec{K}_{ }) = \sum_{\mu=1}^N [\mathbf{M}^{-1}]_{\nu\mu} \cdot \vec{E}_0$
Polarizabilidad efectiva (3.66):	$\overleftrightarrow{\mathbf{M}}_{\nu\mu} = \delta_{\nu\mu} \left(\overleftrightarrow{\alpha}_{\nu}^E \right)^{-1} + \overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\nu\mu}^{\neq}$
Suma Reticular (3.67):	$\overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\nu\mu}^{\neq} = \frac{1}{4\epsilon\mathcal{A}} \sum_{\vec{K}_{\mathbf{m}} \in \Lambda^*} \overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\Lambda}^{(1)}(\vec{r}_{\nu\mu}; \vec{K}_{ }, \eta)$ $+ \frac{1}{8\pi\epsilon} \begin{cases} \sum_{(\vec{R}_{\mathbf{n}} \neq \vec{0}_{\Lambda}) \in \Lambda} e^{i\vec{K}_{ } \cdot \vec{R}_{\mathbf{n}}} \overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\Lambda}^{(2)}(\vec{0}_{\Lambda}; \vec{K}_{ }, \eta) + \overleftrightarrow{\mathcal{C}}_0 & \mu = \nu \\ \sum_{\vec{R}_{\mathbf{n}} \in \Lambda} e^{i\vec{K}_{ } \cdot \vec{R}_{\mathbf{n}}} \overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\Lambda}^{(2)}(\vec{r}_{\nu\mu}; \vec{K}_{ }, \eta) & \mu \neq \nu \end{cases}$
Método de Ewald (3.97), (3.98):	$\overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\Lambda}^{(1)}(\vec{r}_{\nu\mu}; \vec{K}_{ }, \eta) = \left\{ \begin{pmatrix} k^2 - \kappa_{\mathbf{m},x}^2 & -\kappa_{\mathbf{m},x} \kappa_{\mathbf{m},y} & 0 \\ -\kappa_{\mathbf{m},x} \kappa_{\mathbf{m},y} & k^2 - \kappa_{\mathbf{m},y}^2 & 0 \\ 0 & 0 & k^2 \end{pmatrix} e^{i\vec{k}_{\mathbf{m}} \cdot \vec{r}_{\nu\mu}} g(0) \right. \\ \left. + \overleftrightarrow{\mathbf{I}} e^{i\vec{k}_{\mathbf{m}} \cdot \vec{r}_{\nu\mu}} \frac{d^2 g(z)}{dz^2} \Big _{z=0} \right\} (k\gamma_{\mathbf{m}})^{-1}$ $\overleftrightarrow{\mathcal{G}}_{\Lambda}^{(2)}(\vec{r}_{\nu\mu}; \vec{K}_{ }, \eta) = \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \left[k^2 F(\rho_{\mathbf{m}}) + \frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} \Big _{\rho=\rho_{\mathbf{n}}} \right]$ $+ \begin{pmatrix} \rho_{\mathbf{n},x}^2 & \rho_{\mathbf{n},x} \rho_{\mathbf{n},y} & 0 \\ \rho_{\mathbf{n},y} \rho_{\mathbf{n},x} & \rho_{\mathbf{n},y}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} \right) \right]$
$\vec{k}_{\mathbf{m}} = \vec{K}_{ } + \vec{K}_{\mathbf{m}}$ $\vec{\rho}_{\mathbf{n}} = \vec{r}_{\nu\mu} - \vec{R}_{\mathbf{n}}$	$; \quad k\gamma_{\mathbf{m}} = \begin{cases} \sqrt{ \vec{K}_{ } + \vec{K}_{\mathbf{m}} ^2 - k^2} & , \quad k \leq \vec{K}_{ } + \vec{K}_{\mathbf{m}} \\ -i\sqrt{k^2 - \vec{K}_{ } + \vec{K}_{\mathbf{m}} ^2} & , \quad \vec{K}_{ } + \vec{K}_{\mathbf{m}} < k \end{cases}$

Tabla 3.3: Expresiones más importantes de la implementación del Modelo de Dipolos Acoplados al estudio de Arreglos periódicos dos dimensionales ($d_{\Lambda} = 2$), estudiados en un espacio tridimensional ($d = 3$).

Funciones escalares: Espacio Dual
$g(0) = 2 \operatorname{erfc} \left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta} \right)$ $\left. \frac{dg(z)}{dz} \right _{z=0} = 0$ $\left. \frac{d^2 g(z)}{dz^2} \right _{z=0} = 2(k\gamma_{\mathbf{m}})^2 \operatorname{erfc} \left(\frac{k\gamma_{\mathbf{m}}}{2\eta} \right) - \frac{4\eta}{\sqrt{\pi}} k\gamma_{\mathbf{m}} e^{-(k\gamma_{\mathbf{m}})^2/4\eta^2}$
Funciones escalares: Espacio Real
$F(\rho) = \frac{1}{\rho} \left\{ e^{ik\rho} \operatorname{erfc} \left(\rho\eta + \frac{ik}{2\eta} \right) + e^{-ik\rho} \operatorname{erfc} \left(\rho\eta - \frac{ik}{2\eta} \right) \right\}$ $\frac{1}{\rho} \frac{dF(\rho)}{d\rho} = \frac{1}{\rho^3} \left\{ (-1 + ik\rho) \operatorname{erfc} \left(\rho\eta + \frac{ik}{2\eta} \right) e^{ik\rho} \right.$ $\left. + (-1 - ik\rho) \operatorname{erfc} \left(\rho\eta - \frac{ik}{2\eta} \right) e^{-ik\rho} - \frac{4\eta}{\sqrt{\pi}} \rho e^{-\rho^2\eta^2 + \frac{k^2}{4\eta^2}} \right\}$ $\frac{1}{\rho} \frac{1}{d\rho} \left[\frac{1}{\rho} \frac{dF(\rho)}{d\rho} \right] = \frac{1}{\rho^5} \left\{ (-k^2\rho^2 - 3ik\rho + 3) \operatorname{erfc} \left(\rho\eta + \frac{ik}{2\eta} \right) e^{ik\rho} \right.$ $\left. + (-k^2\rho^2 + 3ik\rho + 3) \operatorname{erfc} \left(\rho\eta - \frac{ik}{2\eta} \right) e^{-ik\rho} \right.$ $\left. + \frac{4\eta}{\sqrt{\pi}} (2\eta^2\rho^3 + 3\rho) e^{-\rho^2\eta^2 + \frac{k^2}{4\eta^2}} \right\}$ $\overleftarrow{C}_0 = \overleftarrow{I} \frac{4}{3} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \eta(\eta + k)(\eta - k) e^{\frac{k^2}{4\eta^2}} + k^3 \left[\operatorname{erfi} \left(\frac{k}{2\eta} \right) - i \right] \right)$

Tabla 3.4: Funciones escalares empleadas para el cálculo de la suma reticular

Simulación de Propiedades Ópticas de Nanoestructuras

Como se mencionó previamente en el capítulo 3, dadas las dimensiones y estudio de geometrías de partículas diferentes a la canónica (esférica), así como a la interacción entre muchas partículas, no es posible describir de manera completamente analítica la interacción de la luz con un cristal plasmónico, y en particular la excitación de las resonancias de la red superficial (SLRs). En consecuencia, para analizar de manera teórica el arreglo plasmónico, se propone resolver numéricamente o semianalíticamente los eigenmodos de las ecuaciones de Maxwell. En primera instancia, se realiza la simulación de una nanopartícula aislada embebida en un medio homogéneo usando el método de elemento finito (FEM). Este análisis nos permitió caracterizar la contribución de la simetría de la partícula al campo cercano dispersado, así como la contribución del plasmón de superficie localizado (LSPR) a las resonancias plasmónicas del cristal. Posteriormente, se simuló el arreglo periódico por el método semianalítico de dipolos acoplados (CDA) y por el método numérico de elemento finito (FEM), de manera independiente. Con base en los resultados de los diferentes métodos, se comparan los mapas de extinción obtenidos y se realiza una interpretación física de la respuesta del sistema. Finalmente, existiendo una excelente concordancia entre la extinción numérica y semianalítica, analizamos el campo cercano dispersado por el cristal plasmónico.

4.1. Método de Elemento Finito

Para simular la respuesta óptica del cristal plasmónico, en el presente trabajo se hizo uso del software comercial COMSOL Multiphysics®. Este cuenta con diferentes módulos para resolver las ecuaciones diferenciales parciales acopladas, con condiciones de frontera, que describen el comportamiento de diferentes sistemas físicos de interés. En general, el programa COMSOL cuenta con las herramientas dentro de su interfaz gráfica para modelar la geometría de un sistema de estudio. De esta manera, con base en la geometría construida y propiedades asignadas por el usuario, el software genera una discretización del sistema en el espacio, la cual puede ser generada de manera automática o supervisada. Una vez generado el mallado, el software resuelve el sistema de ecuaciones por medio del Método de Elemento Finito (FEM), como se esbozó en la sección 3.1. Para el caso particular en que se analiza la interacción de la luz con materia, el módulo útil de COMSOL corresponde al de Wave Optics. En este se resuelven los eigenmodos de las ecuaciones de Maxwell, caracterizando las propiedades ópticas de los materiales por medio del índice de refracción, para realizar un análisis del campo eléctrico cercano en un rango de longitudes de onda incidentes.

4. SIMULACIÓN DE PROPIEDADES ÓPTICAS DE NANOESTRUCTURAS

4.1.1. Software COMSOL. Módulo Wave Optics

El módulo Wave Optics es un complemento de la plataforma de software COMSOL Multiphysics® y es usado por científicos para comprender, predecir y estudiar la propagación de ondas electromagnéticas y los efectos de resonancia en aplicaciones ópticas. Al analizar las distribuciones de campos electromagnéticos, los coeficientes de transmisión y reflexión, así como la disipación de energía, pueden ser calculado de manera numérica. Por lo tanto, con base en un diseño propuesto, las simulaciones de este tipo conducen a productos y métodos más potentes y eficientes.

Para optimizar los diseños de dispositivos fotónicos, óptica integrada, guías de ondas ópticas, acopladores, fibra óptica y más, se deben tener en cuenta los escenarios del mundo real. Las capacidades de modelado multifísico del software COMSOL Multiphysics® ayudan a estudiar cómo otras físicas afectan las estructuras ópticas; por ejemplo, efectos de estrés óptico, electro-óptico y acústico-óptico, así como calentamiento electromagnético. Debido a la amplia gamma de sistemas electromagnéticos que se pueden estudiar, el módulo de Wave Optics se subdivide en varias interfaces (Observar figura 4.1).

Módulo Wave Optics		
	Interfaz	Ecuación
Dependiente del Tiempo	Tiempo explícito	$\epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \nabla \times \vec{H} + \sigma \vec{E} = \vec{0}$ $\mu_0 \mu_r \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} - \nabla \times \vec{E} = \vec{0}$
	Transitoria	$\nabla \times [\mu_r^{-1} \nabla \times \vec{A}] + \mu_0 \sigma \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = \vec{0}$
Estacionario	Dominio de frecuencias	$\nabla \times [\mu_r^{-1} \nabla \times \vec{E}] + k_0^2 \left(\epsilon_r - \frac{i\sigma}{\omega \epsilon_0} \right) \vec{E} = \vec{0}$
	Envolvente de haz	$(\nabla - i\vec{k}_1) \times [\mu_r^{-1} ((\nabla - i\vec{k}_1) \times \vec{E})] + k_0^2 \left(\epsilon_r - \frac{i\sigma}{\omega \epsilon_0} \right) \vec{E}_1 = \vec{0}$

Figura 4.1: Clasificación de interfaces dentro del módulo de wave optics del software de comsol

En particular, dado que la teoría desarrollada en este proyecto se fundamenta en el análisis de las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias, se trabajó con la interfaz de dominio de frecuencias en el módulo de Wave Optics de COMSOL, ya que esta interfaz se utiliza para resolver distribuciones de campos electromagnéticos armónicos en el tiempo. Cabe mencionar que en esta interfaz, el tamaño máximo del elemento de malla debe limitarse a una fracción de la longitud de onda incidente. De esta manera, el tamaño del dominio que se puede simular se escala con la cantidad de memoria de computadora disponible y la longitud de onda. Además, esta interfaz admite varios tipos de estudio, tales como Dominio de frecuencia, Frecuencia propia, Análisis de modo y Análisis de modo límite. El tipo de estudio usado en este proyecto corresponde al de dominio de frecuencia, ya que este dominio se utiliza para simulaciones basadas en fuentes de una sola frecuencia o de una secuencia de frecuencias. De esta manera, la interfaz de dominio de frecuencias, resuelve la ecuación de onda armónica de tiempo para el campo eléctrico.

En específico, en este trabajo usamos el software para modelar la respuesta óptica de partículas aisladas y sistemas periódicos, realizando un modelo para cada uno de los casos. Así, debido a que los cristales plasmónicos están compuestos de partículas de unos cientos de nanómetros, así

como de diversas geometrías, es conveniente primero analizar la respuesta óptica de la partícula aislada y posteriormente la respuesta del sistema periódico.

4.2. Partícula Aislada

Simular la partícula aislada permite estudiar la contribución de los plasmones localizados de superficie (SPR) al espectro del cristal plasmónico. En general, con base en el modelo numérico de la partícula aislada se puede modificar los SPR por medio del tamaño y geometría de la partícula, así como de las propiedades ópticas de la misma; ya que estas resonancias dependen fuertemente de estas características. A su vez, el control sobre los SPR, asociados a una respuesta plasmónica, induce un cierto control de las resonancias de red superficial (SLR), las cuales corresponden a la respuesta óptica del cristal plasmónico. Debido a esto, es conveniente comenzar con el análisis de la respuesta óptica de la partícula aislada.

En particular, para el diseño de la geometría del sistema aislado haciendo uso de la interfaz de COMSOL, se simuló la geometría de la partícula en el centro de una esfera de mayor tamaño, que funge numéricamente como los alrededores de la partícula y cuyas dimensiones dependen del rango de longitudes de onda en el que se planea estudiar la respuesta óptica. Por otra parte, para simular que el medio en el que se encuentra embebida la nanopartícula es continuo se simula una capa artificial que rodee al sistema físico modelado, cuyo nombre es capa perfectamente acoplada (PML por sus siglas en inglés). Este material absorbe las ondas que lo traspasan y evita que estas se reflejen en la interfaz entre el sistema físico y la superficie interior de la PML, modelando así que el sistema que rodea la nanopartícula es infinito.

Con respecto a la caracterización de los materiales, para simular a una partícula del plata embebida en silicio, a la matriz y al PML se les asignó un índice de refracción constante de 1.46, mientras que a la partícula se le asignó el índice de refracción del plata extraído de la base de datos de COMSOL, el corresponde a los datos experimentales reportados por Johnson & Crhisty en la referencia [37]. Para visualizar la dependencia de las propiedades ópticas de las partículas de plata con respecto a la longitud de onda incidente, se enfatiza el hecho de que los valores de la parte real e imaginaria del índice de refracción de la plata usados en el modelo numérico coinciden con los datos de la función dieléctrica experimental reportados en la gráfica de la Figura 3.9.

La geometría del sistema usado para simular la respuesta de una partículas aislada con geometría esférica o cilíndrica, respectivamente, se muestra en la Figura 4.2. También se ilustran visualmente los parámetros geométricos cruciales para la convergencia del modelo numérico. En ambos casos, el parámetro t_h corresponde al tamaño del sistema físico modelado, mientras que el parámetro t_{pml} corresponde al grosor del PML. Como se mencionó previamente, es conveniente definir los valores de los parámetros geométricos del sistema simulado en función del rango de longitudes de onda en el que se planea estudiar la respuesta del sistema. De esta manera, con base en un barrido de los parámetros geométricos del sistema modelado, se determina que los parámetros requeridos para la convergencia del modelo en COMSOL corresponden a t_h y t_{pml} igual en magnitud a la longitud de onda máxima del rango de análisis. Por lo tanto, dado que se buscó estudiar la respuesta de la partícula en el rango de longitudes de onda de la luz visible (400 nm - 800 nm), las dimensiones para la convergencia del modelo corresponden a $t_h = 800 \text{ nm} = t_{pml}$.

Por otra parte, como ya se mencionó brevemente, el método de elemento finito requiere de una discretización espacial del sistema para resolver numéricamente las ecuaciones de Maxwell, por

4. SIMULACIÓN DE PROPIEDADES ÓPTICAS DE NANOESTRUCTURAS

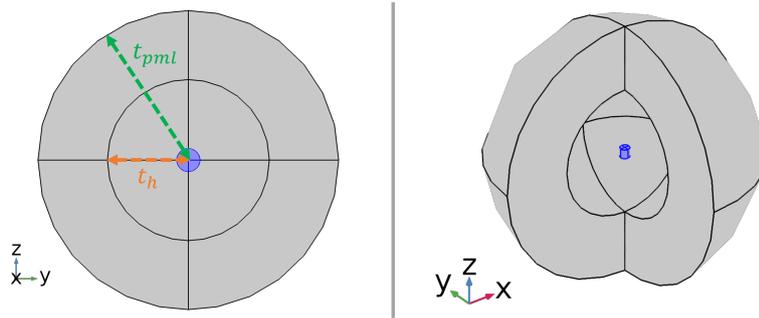


Figura 4.2: Modelo geométrico para la partícula aislada generado con la interfaz gráfica de COMSOL. Para ejemplificar su uso en el estudio de diferentes geometrías, se muestra el modelo para una partícula esférica (izq) y cilíndrica (der). En ambos casos, se remarca de color azul a la partícula.

lo que se requiere de un diseño del mallado que asegure la convergencia del modelo. Este diseño incluye tanto la construcción de la geometría del sistema contemplando superficies que se discretizan de manera paramétrica para asegurar la conservación de las simetrías, así como la elección del tamaño máximo y mínimo del elemento de mallado.

En particular, para asegurar la conservación de simetría, en nuestro modelo se optó por dividir la geometría en los ocho cuadrantes resultantes de la intersección de los planos cartesianos. Esto se puede llevar a cabo en la interfaz gráfica de COMSOL usando las herramientas de construcción de *Booleans and Partitions* en la pestaña *Geometry*, como se muestra en la Figura 4.3.

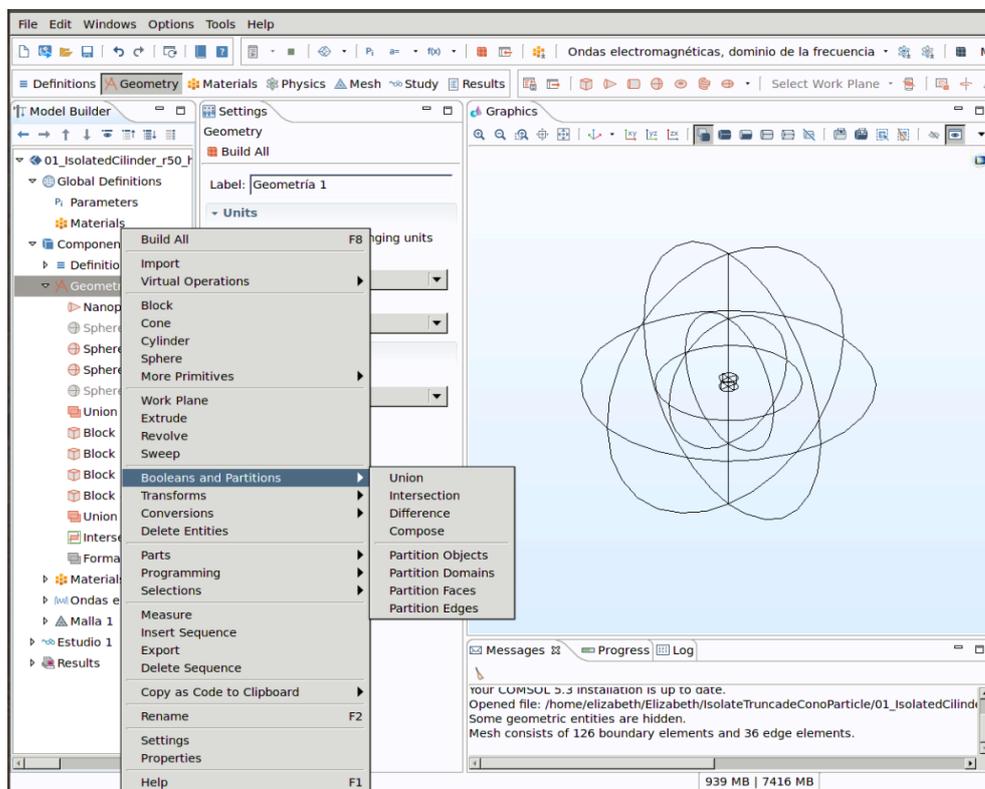


Figura 4.3: Captura de interfaz gráfica del software de COMSOL. Se señala la sección del modelo para la construcción de la geometría del sistema por medio de booleanos con cuerpos geométricos elementales.

Una vez construidas las secciones procedemos a realizar el mallado de una de los octavos del sistema, habilitando la opción de mallado definido por el usuario en la pestaña *Mesh* de la interfaz gráfica. Se recomienda empezar realizando el mallado de la superficie de la partícula, usando la herramienta de mallado *Free Triangular* y definiendo distribuciones en las aristas de la geometría para asegurar que la superficie de la partícula posea el mínimo tamaño de elemento de mallado permitido. Esto último se puede asegurar escribiendo la línea de comando $\text{floor}(\text{parametro_dimensional_de_partícula}/\text{tamaño_mínimo_elemento_de_mallado})$ dentro de la sección de *Number of elements* de la pestaña de *Distribution*, (observar Figura 4.4).

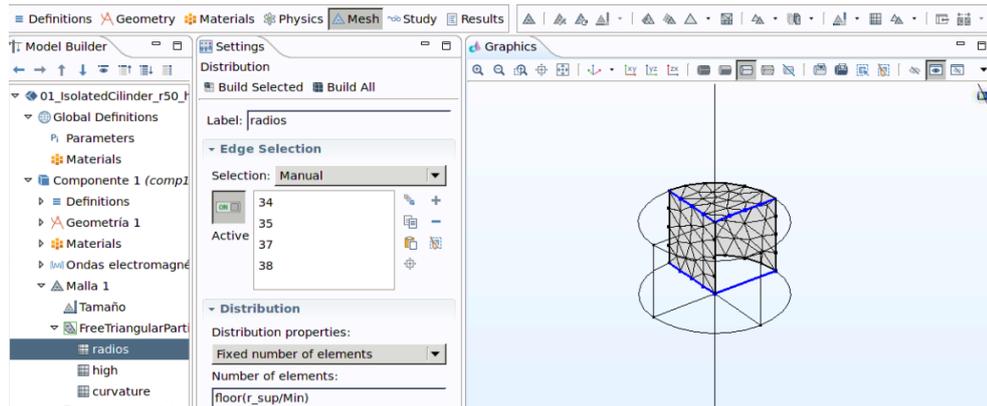
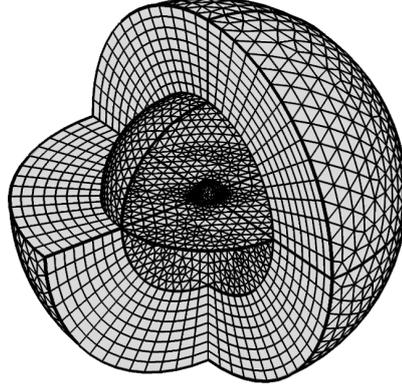


Figura 4.4: Discretización de la superficie de un octavo de la partícula. En particular, se ejemplifica la parametrización del radio del cilindro por medio de la elección del número de elementos en la arista.

Una vez que se realiza todo el mallado de la superficie de la partícula en el cuadrante en interés, procedemos a mallar la superficie interna del dominio de la capa PML dentro del mismo cuadrante. El procedimiento en este caso es análogo al realizado en el mallado de la superficie de la partícula, salvo que en este caso la distribución en las aristas se realizara con respecto al tamaño máximo de elemento de mallado permitido. Posteriormente, se procede a mallar el volumen de dominio físico, seleccionando el volumen de la partícula y de la esfera interna, y habilitando la herramienta *Free Tetrahedra* en la pestaña de *Mesh*. Para concluir el mallado del cuadrante seleccionado, se procede a mallar el dominio del PML habilitando la herramienta *Sweep* y seleccionando el dominio del PML en el cuadrante. Por último, para generar el mallado de toda la geometría del sistema, habilitamos la herramienta de *Copy* para copiar el mallado del cuadrante realizado en los demás cuadrantes. Por lo tanto, con base en la copia del mallado aseguramos la conservación de la simetría en la solución numérica del problema. Para ejemplificar el mallado final, en la Figura 4.5 se muestra la discretización del modelo para el caso de la partícula esférica, generado con el procedimiento descrito anteriormente. Es importante remarcar que en esta figura es posible apreciar visualmente la replicación del mallado por cuadrantes, detalle fundamental para asegurar la conservación de las simetrías que posee el sistema.

Finalmente, realizando un barrido en función del tamaño del Elemento se análisis la convergencia del sistema, de tal manera que se determinó que el tamaño del mallado requerido consistía en un tamaño de elemento mínimo de $d_{inf}/4$ y de un tamaño máximo de elemento de $\lambda_{min}/2^3$, donde d_{inf} denota el parámetro geométrico menor de la partícula y λ_{min} denota la longitud de onda mínima en el rango de análisis. Es preciso aclarar que los límites superior e inferior del tamaño del mallado se especifican en la pestaña *Mesh* de la interfaz gráfica en la sección de *Size*. También, cabe mencionar que estos parámetros se eligieron específicamente para modelar la partícula

Figura 4.5: Discretización espacial del sistema para la implementación del método de elemento finito. En esta representación se han ocultado algunas superficies para visualizar la simetría del mallado



esférica y cilíndrica estudiadas en este trabajo. En caso de que se modele otro tipo de geometría y tamaño de partícula, es probable que sea necesario realizar un nuevo análisis de convergencia para la partícula de interés.

Por otra parte, para perturbar el sistema, se modela un campo eléctrico de fondo descrito por la expresión:

$$\vec{E}_{in}(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} = \vec{E}_0 \exp(i(k_x x + k_y y + k_z z)), \quad (4.1)$$

donde \vec{E}_0 denota una amplitud real y $\vec{K} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} + k_z \hat{z}$ representa el vector de onda. De manera congruente, la relación (4.1) corresponde a una onda electromagnética plana con vector de onda k y con vector de polarización en dirección de \vec{E}_0 . Cabe enfatizar que el ángulo de incidencia θ se implementa en la definición de las componentes del vector de onda, por lo tanto, haciendo uso de las expresiones para coordenadas esféricas se tiene que $k_x = k \sin(\theta) \cos(\varphi)$, $k_y = k \sin(\theta) \sin(\varphi)$, $k_z = k \cos(\theta)$, con $k = \frac{2\pi}{\lambda} n_0$ y $n_0 = 1.46$, donde este último corresponde al índice de refracción del silicio. De acuerdo con lo anterior, se observa que el campo simulado coincide con el campo incidente definido con la expresión (3.61), siendo congruentes en el análisis. Además, para simular las polarizaciones canónicas de luz linealmente polarizada, se sustituye al vector \vec{E}_0 por los vectores $\hat{n}_\perp = \sin\theta \hat{x} - \cos\theta \hat{y}$ y $\hat{n}_\parallel = -\cos\theta \cos\varphi \hat{x} - \sin\theta \cos\varphi \hat{y} - \sin\theta \hat{z}$, para considerar polarización s y p, respectivamente.

Con base en el modelo antes descrito, se calcula numéricamente el campo eléctrico. A partir de los resultados se determina la sección transversal de esparcimiento C_{sca} y la sección transversal de absorción C_{abs} . Para esto se calcula la integral de la proyección del vector de Poynting con respecto a la normal en la interfase entre el PML y el espacio físico, obteniendo así la energía que atraviesa la superficie externa del sistema físico para el cálculo de C_{sca} ; o bien realizando el mismo cálculo, pero ahora con respecto a la normal a la superficie de la partícula, obteniendo así la energía que atraviesa la superficie de la partícula para el cálculo de C_{abs} . Los resultados anteriores se normalizan con respecto a la intensidad de la onda electromagnética incidente para considerar únicamente la contribución al campo esparcido debido a la interacción con la partícula.

El resultado numérico de las secciones transversales, para el caso de luz en incidencia normal ($\theta_i = 0^\circ$), con vector de polarización S, para las dos geometrías de las partículas, se muestran en la Figura 4.6. A partir de los resultados de la sección transversal de esparcimiento se observan dos resonancias características de la partícula esférica aislada ($\lambda = 408$ nm y $\lambda = 519$ nm) y una resonancia característica de la partícula cilíndrica de 100 nm de altura ($\lambda = 380$ nm).

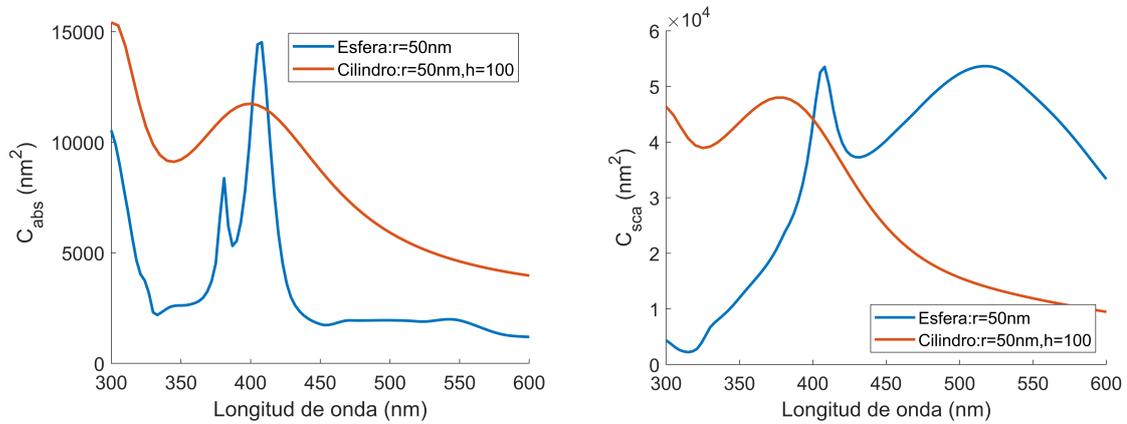


Figura 4.6: Gráfica del espectro a incidencia normal de la sección transversal de absorción (C_{abs}) y de esparsamiento (C_{sca}) para la partícula esférica y cilíndrica obtenido de la simulación de la partícula aislada embebida en un medio homogéneo con índice de refracción de 1.46.

En específico, para justificar la implementación del método de dipolos acoplados nos interesa caracterizar los modos plasmónicos de la partícula aislada bajo la excitación de un campo eléctrico incidente. En particular, con los resultados del método numérico podemos analizar el campo cercano producido por la nanopartícula plasmónica, así como la distribución de carga en la superficie de la partícula para definir el modo multipolar. Los resultados numéricos para las longitudes de onda de 408 nm y 546 nm en el caso de la partícula esférica, para longitud de onda de 400 nm y 650 nm para la partícula cilíndrica, se muestran en la Figura 4.7.

Primero, en la Figura 4.7 es posible observar que la asignación del signo de carga coinciden con la dirección del campo eléctrico, es decir, se observa que las líneas de campo divergen de las regiones con carga positiva y que las líneas de campo convergen en las cargas negativas. Este resultado corrobora la consistencia de los cálculos numéricos del campo cercano.

Segundo, con base en la distribución de carga en la partícula aislada, es posible observar que, para longitudes de onda cortas, muestra un comportamiento cuadrupolar, tanto para la partícula esférica como la cilíndrica. Por el contrario, para longitudes de onda largas, ambas partículas muestran un comportamiento dipolar. Por lo tanto, con base en los resultados de la simulación con el método de Elemento Finito, se comprueba que, aún para partículas de diferentes geometría y de algunos cientos de nanómetros, es posible aplicar la aproximación dipolar para la descripción de las partículas en longitudes de onda dentro del rango de luz visible, justificando así la implementación del método de dipolos acoplados para el estudio de cristales plasmónicos y su uso en el campo de la nanofotónica.

Por último, cabe resaltar que el interés mostrado en el análisis de partículas con geometría cilíndrica radica en un argumento experimental. Esto se debe a que en la práctica es complicado fabricar partículas con geometría esférica perfecta, mientras que las partículas con geometría cilíndrica son más sencillas de fabricar. Por consiguiente, es recomendable estudiar ambos casos para ponderar las propiedades de cada uno con respecto al otro.

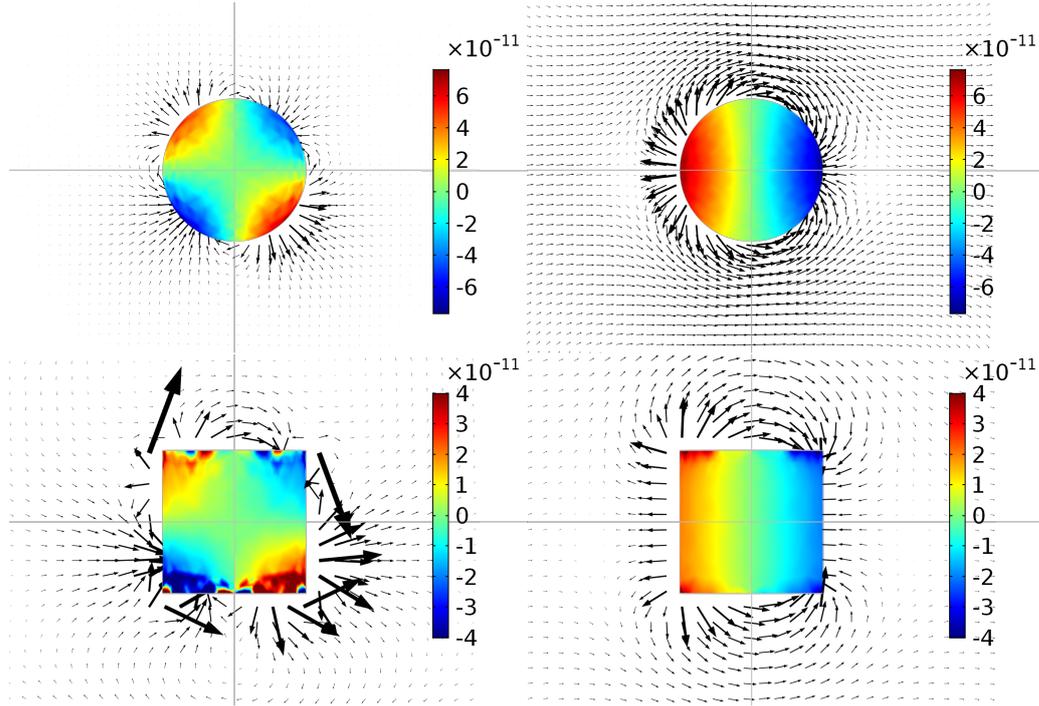


Figura 4.7: Resultados numéricos de la distribución de carga superficial y campo eléctrico (flechas negras) simulado en el plano YZ a $X = 0$. Las imágenes superiores corresponden a los resultados para la partícula esférica: (izq) $\lambda = 408$, (der) $\lambda = 546$; las imágenes inferiores corresponden a los resultados para la partícula cilíndrica: (izq) $\lambda = 400$, (der) $\lambda = 650$.

4.3. Estudio de cristal plasmónico con simetría hexagonal

El sistema periódico estudiado en este trabajo corresponde a una red dos-dimensional con simetría **Hexagonal**, cuya configuración geométrica se ilustra en la Figura 4.8(a). Las propiedades de traslación de este sistema quedan descritos en términos de los vectores de red:

$$\vec{t}_1 = \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}, 0) \quad ; \quad \vec{t}_2 = \frac{a}{2} (-1, \sqrt{3}, 0) \quad \text{con} \quad a = \sqrt{3}L \quad (4.2)$$

y por lo vectores base:

$$\vec{d}_1 = (0, 0, 0) \quad ; \quad \vec{d}_2 = (0, L, 0), \quad (4.3)$$

donde L denota la distancia de centro a centro entre vecinos cercanos. Como es posible notar, la red con simetría hexagonal está conformada por dos redes con simetría de traslación triangular, de tal manera que una se encuentra desplazada con respecto a la otra con base en el vector \vec{d}_2 , como se aprecia en la Figura 4.8(b). Esta condición provoca que la estructura base del arreglo hexagonal sea similar al del arreglo triangular. Sin embargo, cabe remarcar que la región romboidal (Figura 4.8(a)), la cual reproduce el cristal hexagonal por medio traslación de la misma, no coincide con la celda de Wigner-Seitz asociada al sistema triangular (Figura 4.8(b)). Esto se debe a que en el caso del arreglo hexagonal el sistema está compuesto por dos redes de Bravais no commensurable, por lo que para este caso es necesario considerar una celda unitaria que contenga dos partículas. A su vez, esta propiedad hace que la física del sistema hexagonal sea mucho más rica, ya que se pueden explorar fenómenos electromagnéticos modulados por la interacción entre las partículas dentro de la celda unitaria.

En este mismo contexto, gracias a la invariancia de traslación del sistema, se sabe que el cristal plasmónico cuenta un espacio recíproco asociado, el cual se construye de acuerdo con lo expuesto en la sección 3.4.0.1, específicamente con base en la condición (3.53). Por consiguiente, en la Figura 4.8(c) se muestra el espacio recíproco asociado a la red con simetría de traslación hexagonal, la cual, coincide con el espacio recíproco asociado a la red con simetría de traslación triangular.

Ahora bien, dado que el espacio recíproco conserva una estructura periódica, para realizar el análisis de este, es conveniente construir la celda unitaria asociada a dicho espacio, a la cual se le denomina con el nombre de **Primera Zona de Brillouin**. Esta zona tiene la propiedad de reproducir todo el espacio recíproco por medio de traslación de esta, propiedad que le hace esencia en la reducción del análisis requerido. Por otra parte, dado que la zona Brillouin corresponde a un polígono regular, dentro de esta se puede delimitar una región (más pequeña) que condense toda la información de esta. A esta región se le conoce con el nombre de **Zona Irreducible** ya que, como su nombre infiere, es la región mínima requerida para la reproducción de la Zona de Brillouin por medio de transformaciones rígidas como rotaciones, reflexiones y traslaciones. Más aún, debido a la enorme importancia de la zona irreducible en la descripción de las propiedades de simetría del sistema, a sus vértices se les conoce con el nombre de **puntos de alta simetría**. Estos puntos serán de muy útiles en el estudio del sistema ya que, para condensar la información de la zona irreducible, se suele hacer las mediciones de la respuesta del sistema a lo largo de la trayectoria entre los puntos de alta simetría. Esto permite restringir y mostrar de manera eficiente los resultados en función de las simetrías de sistema. Para el caso particular de la red con simetría hexagonal, en la Figura 4.8(c) se ilustra la Primera zona de Brillouin y los puntos de alta simetría, denotados con las letras Γ , M y K.

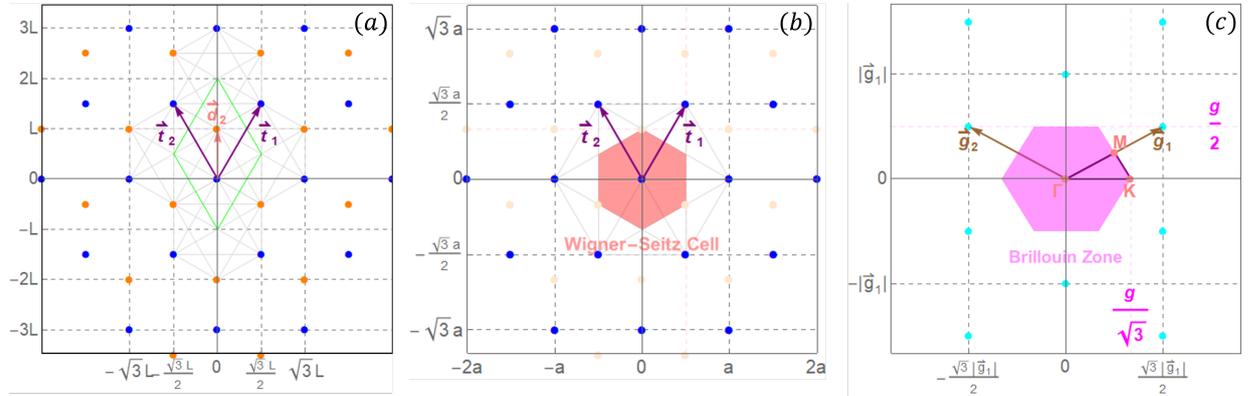


Figura 4.8: Estructura Geométrica de la red hexagonal. (a) Espacio real, donde se muestra la celda unitaria asociada (rombo verde). (b) Coincidencia de la red hexagonal con la red triangular, donde se muestra la celda de Wigner-Seitz asociada a la red triangular (hexágono rosa). (c) Espacio recíproco asociado a las redes triangular y hexagonal. Se resalta la primera zona de Brillouin asociada (hexágono magenta), junto con las trayectorias de alta simetría de la zona (líneas moradas).

De manera congruente, es preciso enfatizar que el escaneo de una trayectoria de alta simetría se explora por medio de la dirección del plano de incidencia con respecto a la geometría del cristal, donde esta dirección es seleccionada por medio de la variable φ , que corresponde al ángulo azimutal de coordenadas esféricas. De esta manera, al comparar las representaciones geométricas (a) y (c) de la Figura 4.8, se observa que el plano de incidencia parametrizado por $\varphi = 0$ corresponde al

4. SIMULACIÓN DE PROPIEDADES ÓPTICAS DE NANOESTRUCTURAS

escaneo de la trayectoria de alta simetría Γ -K; mientras que el plano de incidencia parametrizado por $\varphi = \pi/2$ corresponde al escaneo de la trayectoria de alta simetría Γ -M.

Particularmente, en el presente trabajo nos restringimos al análisis de la trayectoria $\Gamma-K$ ($\varphi = 0$). A continuación, se detalla el análisis numérico y semianalítico de la respuesta óptica del cristal plasmónico con simetría hexagonal de traslación.

4.3.1. Modelo de Dipolos Acoplados

La implementación del modelo de dipolos acoplados se realizó con base en el formalismo físico-matemático desarrollado en el capítulo 3. Para esto se construyó un código computacional en el software comercial MATLAB®R2020a para calcular el campo dispersado por el sistema de partículas ordenadas. Así, para construir el sistema modelado es necesario que el usuario ingrese datos del sistema tales como:

- a = Radio de la partícula
- $Nsep$ = Parámetro de red .
- Rs_crf = Matriz de Mx3 cuyos renglones sean los vectores base (posición de las M-partículas dentro de la celda unitaria)
- $Latt_vecs$ = Matriz de Nx3 cuyos renglones corresponden a los vectores de red (N-traslaciones básica de la celda unitaria para la creación de toda la red).
- $Emed$ = Índice de refracción del medio que rodea a las partículas.
- $jc_Agn2.txt$, $jc_Agk2.txt$ = Archivos .txt con la tabla de datos de la parte real e imaginaria del índice de refracción del material del cual están conformados las partículas.
- $wpAg$, $gammaAg$ = Frecuencia de plasma y constante de amortiguamiento del material de las que están hechas las partículas.

Posteriormente, dado que el estudio de la respuesta óptica del sistema se ha realizado en función de la trayectoria de simetría explorada (φ), el ángulo de incidencia (θ) y la longitud de onda del campo eléctrico incidente (λ), para calcular los mapas de los espectros también es necesario definir la longitud de onda mínima y máxima del rango estudiado, la resolución en el rango de longitudes de onda, el ángulo de incidencia mínimo y máximo del rango estudiado, la resolución en el rango de ángulos de incidencia y el ángulo de incidencia mínimo y máximo del rango estudiado. Una vez ingresadas todas las propiedades del sistema y los rangos de estudios, el código computacional calcula la suma de red asociada al sistema construido en el script. Es importante recordar y tener presente que es necesario definir el tamaño del sistema para que computacionalmente se puede ejecutar, así, para que se ejecute el script es necesario que el usuario defina:

- $NCells$ = el número de celdas en las que se realizara la suma de red.

Con base en los parámetros ingresados por el usuario, se calcula el momento dipolar que modela a las partículas que conforman el sistema ordenado, con base en las expresiones sintetizadas en la sección 3.5.3.1. En suma, se calcula el campo eléctrico esparcido en el régimen de campo lejano (3.78) y con esto se procede a calcular la transmisividad $\langle \mathcal{T} \rangle$, con base en la relación (3.72) y en función del ángulo de incidencia y de la longitud de onda incidente.

En este mismo contexto, cabe mencionar que en la práctica experimental suele ser común cuantificar la respuesta óptica del material por medio de la luz extinguida por la muestra, como se desglosa en la sección C.2 del apéndice C. En consecuencia, para ser congruente con mediciones experimentales, con base en la relación (C.4), en general se puede definir la extinción (Ext) de luz por medio de la relación:

$$Ext(\lambda, \theta, \varphi) = 1 - T(\lambda, \theta, \varphi) \quad (4.4)$$

En particular, para el caso en que la definición de la extinción se implemente con base en el método de dipolos acoplados se tiene que $T(\lambda, \theta, \varphi) = \langle \mathcal{T} \rangle (\vec{r} = \vec{0}; \lambda, \theta, \varphi)$.

En específico, el sistema que se modeló por medio del método semianalítico de CDA corresponde a un arreglo hexagonal con distancia entre vecinos cercanos L igual a 200 nm, conformado de partículas esféricas de plata con radios de 50 nm. Las propiedades ópticas de las nanopartículas se modelaron con base en la función de polarizabilidad ‘pura’ descrita en la sección 3.3.1, y cuya gráfica para el caso particular de la plata se reporta en la Figura 3.10. Mientras que las propiedades de la matriz donde se encuentran embebidas las partículas se simuló usando un índice de refracción constante de $n = 1.46$, el cual modela un medio de SiO_2 , es decir, un vidrio de uso común (Figura 4.9). Finalmente, para el sistema definido, en la gráfica de la Figura 4.9 se reporta el mapa de extinción con respecto a longitud de onda y ángulo incidente (4.4), calculado mediante CDA. Es preciso señalar que el mapa reportado corresponde a una resolución angular de 0.2° y una en resolución en longitudes de onda de 2 nm, para el cual se requirió un tiempo de cómputo de alrededor de 3 horas. Además, como se puede observar, al usar el método de Ewald para la implementación del método CDA, se obtiene un comportamiento ‘suave’ del mapa de extinción. En consecuencia, esta última propiedad de los resultados obtenidos por medio nos induce a afirmar que el modelo semianalítico converge correctamente.

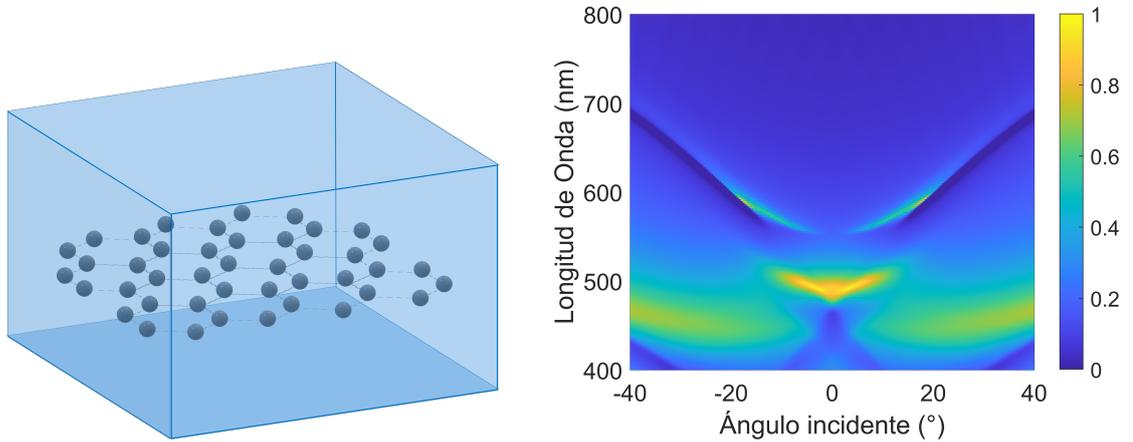


Figura 4.9: Ilustración del cristal plasmónico formado por esferas de 50 nm de radio y con simetría de traslación hexagonal con parámetro de red igual a 200 nm. Espectro de extinción, con base en CDA, del cristal plasmónico al interactuar con luz polarizada en S, con plano de incidencia que escanea la trayectoria de alta simetría Γ –K.

La respuesta óptica del cristal plasmónico reportada en la Figura 4.9 muestra una respuesta híbrida debida a la interacción entre luz-materia en el sistema. Sin embargo, en este punto del análisis, se optó por posponer la interpretación física de los resultados hasta reportar el producto de la simulación mediante el modelo numérico de FEM. La propuesta anterior se realiza con el

4. SIMULACIÓN DE PROPIEDADES ÓPTICAS DE NANOESTRUCTURAS

propósito de primero corroborar los resultados obtenidos con el modelo de dipolos acoplados, así como identificar sus limitaciones en la descripción de la respuesta óptica del cristal, mediante la comparación de resultados obtenidos con un método diferente. De esta manera, para proceder de acuerdo a lo anterior, a continuación, se describe el desarrollo de la simulación del sistema, descrito en esta sección, pero esta vez usando el método de elemento finito. Cabe remarcar que se prestó especial atención en trasladar todas las propiedades del sistema al modelo numérico, así como mantener el rango y la resolución con la que se simuló la respuesta del sistema. Esto último con la finalidad de realizar una comparación fiable de los resultados obtenidos por los dos diferentes métodos abordados.

4.3.2. Método de Elemento Finito

Para simular el cristal plasmónico haciendo uso del software COMSOL, se sigue un procedimiento similar al expuesto para la partícula aislada. En específico, para el modelo del cristal plasmónico, para reproducir la periodicidad del sistema se procede a simular la celda romboidal (Figura 4.8) para construir la estructura geométrica que se muestra en la Figura 4.10. Además, en la misma figura se señalan las condiciones de periodicidad que deben ser impuestas para en los laterales de la celda para asegurar que la respuesta simulada por el software conserve propiedades de simetría.

Por otra parte, para simular las propiedades ópticas para coincidir con al caso simulado por medio de CDA, a la matriz se le asignó el índice de refracción de 1.46, para simular un medio de SiO₂, mientras que a las partículas se les asignó el índice de refracción experimental de la plata reportado en la referencia [37]. Además, cabe enfatizar que las propiedades de los PMLs, los cuales se agregan al modelo con el fin de asegurar que sea infinito en el eje z , se hacen coincidir con las propiedades ópticas del sistema físico, esto con el propósito de simular el caso en que las partículas se encuentran embebidas en un sistema homogéneo.

Ahora bien, una que vez que se construyó la estructura base del sistema, de manera análoga al caso expuesto en la partícula aislada, es necesario analizar la convergencia del modelo en función de los parámetros geométricos libres (t_h, t_{pml}, t_{port}) y del diseño del mallado del sistemas. Así, realizando un barrido de los parámetros, se determinó que los parámetros requeridos para la convergencia del modelo corresponden a los valores reportados en la Tabla 4.1.

Parámetros Geométricos	Parámetros de Mallado
$t_h = \lambda_{max}$	$min = r/6$
$t_{pml} = \lambda_{max}$	$max = \lambda_{min}/(2^3)$
$t_{port} = \lambda_{max}/10$	

Tabla 4.1: Parámetros de la geometría y mallado requeridos para la convergencia del modelo de COMSOL construido para el estudio del cristal plasmónico con simetría de traslación hexagonal, formado por partículas esféricas. λ_{min} y λ_{max} representan los valores extremos del rango de longitudes de onda estudiadas. r representa el radio de las partículas

En consecuencia, dado que se estudió la respuesta dentro del rango de longitudes de onda de la luz visible (400nm-800nm), la dimensión del sistema físico para la convergencia del modelo corresponden al caso $t_h = 800\text{nm} = t_{pml}$, $t_{port} = 80\text{nm}$. La discretización del espacio considerada para el caso antes mencionado se reporta en los esquemas de la derecha en la Figura 4.10.

En la figura anterior se puede apreciar que el tamaño de los elementos del mallado para las nanopartículas es mucho menor que el considerado para el resto de la geometría, esto se debe a que el mallado alrededor de las partículas debe ser más fino para resolver los detalles del campo electromagnético cercano. Asimismo, la observación anterior hace evidente que existen limitaciones para la convergencia con base en los parámetro propuesto en la Tabla 4.1, ya que, para los casos en que $r \gg \lambda_{max}$, la diferencia de tamaños de elemento producirá inconsistencias en el mallado. De esta manera, es importante señalar que los parámetros obtenidos para la convergencia fueron optimizados con base en la condición $4r \sim \lambda_{max}$, por lo que se puede extrapolar principalmente para casos alrededor de esta condición.

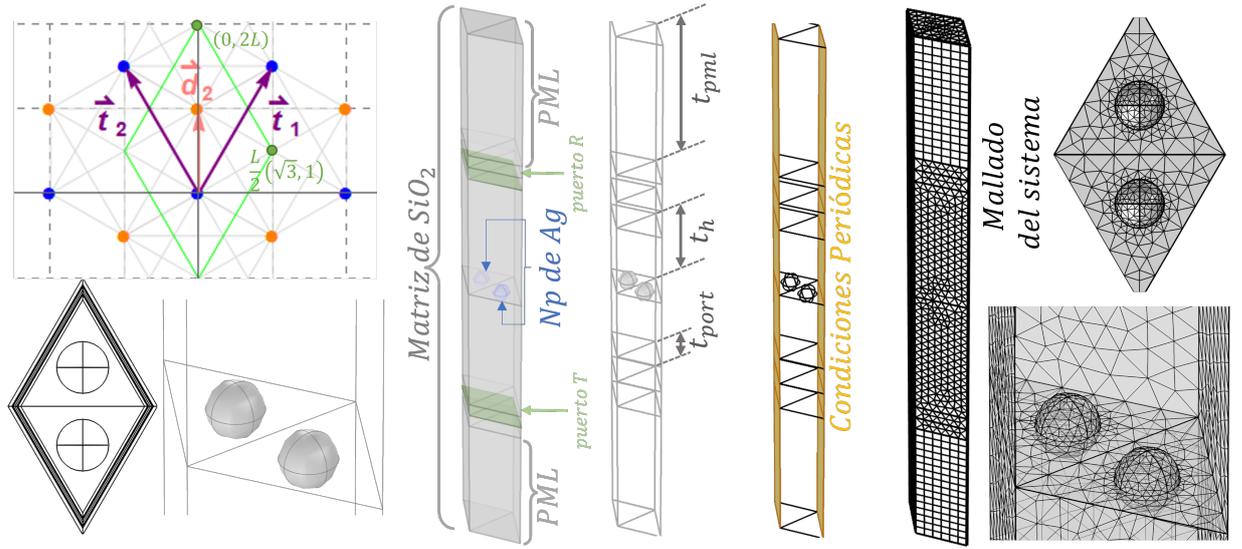


Figura 4.10: Modelo geométrico generado con la interfaz gráfica del programa COMSOL para simular el cristal plasmónico.

Por otra parte, para la iluminación de la nanoestructura se usa la opción de puertos (*Port*) dentro en la interfaz gráfica de COMSOL. En dicha opción se define la onda en una superficie del sistema y se configura la propagación definiendo las propiedades de la luz incidente y la dirección de emisión de la onda en la interfase elegida. De esta manera, dado que suponemos que la luz incide por la parte superior, se toma como puerto emisor la superficie del PML superior (puerto R en Figura 4.10) para genera un campo eléctrico como el de la expresión 4.1, mientras que la superficie PML inferior (puerto T) se asigna como puerto absorbente.

Finalmente, a partir del modelo construido se puede calcular la transmisividad de la muestra integrando el parámetro S21 de la matriz de transferencia, definido en COMSOL por medio del comando `ewfd.S21`, en la superficie señalada con el nombre de puerto T. A su vez, a partir del cálculo de transmisión (T) se calcula la extinción como $Ext = 1 - T$, de manera congruente a la definición (4.4). Es importante remarcar que el uso del parámetro de S12, en lugar del vector de Poynting para calcular el flujo de energía que se transmite, es debido a que esta función del software está automatizada para proporcionar el valor de la transmisión normalizada con respecto a la onda producida por el puerto. Para mayores detalles acerca de la definición del parámetro se puede consultar la referencia [47].

4. SIMULACIÓN DE PROPIEDADES ÓPTICAS DE NANOESTRUCTURAS

En específico, usando el modelo construido se simuló el arreglo hexagonal con parámetro de red L igual a 200 nm, conformado de partículas esféricas de plata con radios de 50 nm. Los resultados del cálculo de la extinción obtenidos por medio del método numérico FEM para el cristal plasmónico mencionado se reportan en la Figura 4.11, junto con los resultados obtenidos por el método semianalítico CDA, previamente reportados en la Figura 4.9, para poder visualizar a la par ambos resultados. Es importante enfatizar que en ambos modelos se excitó con luz linealmente polarizada en s, en un plano de incidencia que escanea la trayectoria de alta simetría $\Gamma-K$, además de conservar la resolución antes impuesta de 0.2° y 2 nma.

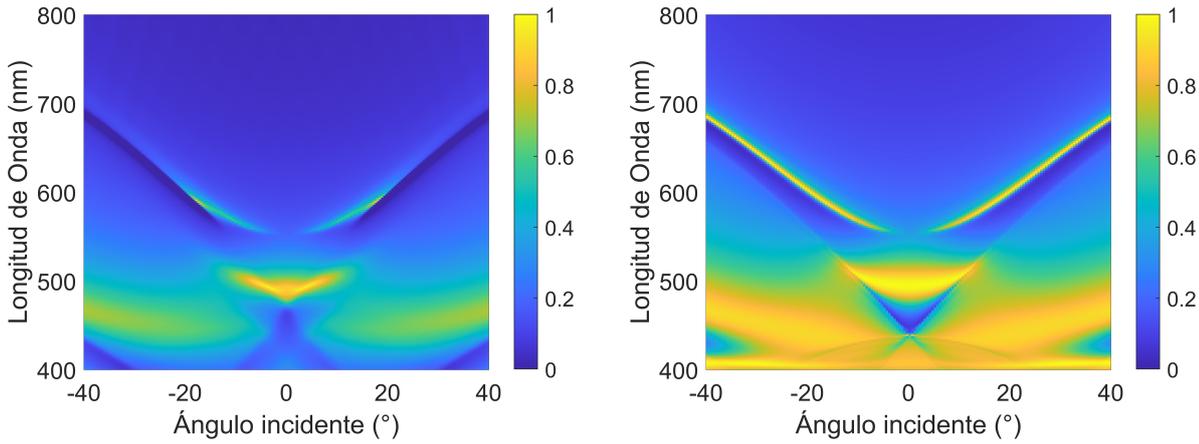


Figura 4.11: Espectros de extinción ($\Gamma-K$, polarización s) del cristal plasmónico formado por esferas de 50 nm de radio y con simetría de traslación hexagonal con parámetro de red igual a 200 nm. Resultados obtenidos con CDA (izq) y FEM (der).

Al comparar las gráficas de la Figura 4.11 se observa que, a grosso modo, los mapas de extinción obtenidos con el método numérico y el método semianalítico conservan una estructura similar. Por lo tanto, dado que los resultados concuerdan independientemente de haberse realizado con base en diferentes métodos, se verifica la consistencia de los resultados y se puede proceder a realizar una interpretación física desde una perspectiva general, es decir, independientemente del método usado.

En las gráficas de la Figura 4.11 las líneas nítidas-continuas que se observan corresponden a las anomalías de Rayleigh (RA), es decir, a los órdenes difractados que se quedan contenidos en el plano de la red. Así, dado que estos modos se tratan de luz difractada, a las RA se les asigna el nombre de modos fotónicos del sistema. Por otra parte, a la respuesta no dispersiva, observada alrededor de $\lambda = 500$ nm y 0° , es la resonancia de plasmón de superficie localizada (LSPR) asociadas a las nanoesferas individuales. Este se corrobora por medio de los resultados de la sección transversal de esparcimiento de la nanoesferas aislada, ya que, al observar la gráfica de la Figura 4.6, se comprueba que una de la resonancias de la partícula individual coincide con la longitud de onda de 500 nm, razón por la cual se le asigna el nombre de modo plasmónico del sistema.

Posteriormente, una vez que identificados los modos fotónicos y plasmónicos, podemos observar que en el mapa de extensión existen algunas características del espectro las cuales no se pueden describir dentro de las dos clasificaciones antes mencionadas. Un ejemplo de esto es el caso de la banda que se corta a ángulos pequeños, alrededor de la longitud de onda de 570 nm. En general,

las anomalías de este estilo demuestran la existencia de hibridación de modos en el cristal plasmónico, a los cuales se les conoce con el nombre de resonancias de red superficial (SLR). Siguiendo este razonamiento, es posible señalar que la banda a 570 nm es resultado del acoplamiento de las RA con la LSPR a 500 nm, lo que da como resultado una SLR ancha y plana. Así mismo, se observa que el modo a 570 nm se vuelve fuertemente dispersivo y su ancho de línea se estrecha a medida que se recorre la gráfica en dirección de ángulos pequeños (12°). Cabe resaltar que la existencia de bandas planas es de interés en la nanofotónica ya que se proyectan como regiones donde se pueden generar fenómenos interesantes de modelado de luz, de manera similar al de su análogo del estado sólido, en el cual las bandas electrónicas planas inducen una velocidad de grupo de los electrones nula, por lo que se interpreta como regiones donde los electrones dentro del sistema están “quietos”.

Por otra parte, el modelo de COMSOL construido puede ser explotado para explorar la respuesta del cristal en función de la geometría de la partícula. Para esto solo es necesario cambiar la geometría, de la partícula, dentro del modelo y realizar pequeños cambios en el mallado del sistema, de tal manera que se ajuste a la nueva geometría de la partícula. Más aún, si la geometría de la partícula es tal que su parámetro geométrico menor d_{min} cumple que $4d_{min} \sim \lambda_{max}$, entonces se pueden extrapolar los parámetros de la Tabla 4.1 para asegurar la convergencia del modelo numérico. Así, de acuerdo con lo anterior, en el presente trabajo se usó el modelo numérico para estudiar la respuesta óptica del cristal plasmónico, con la simetría hexagonal, en función de la geometría de las nanopartículas que lo componen. En específico, para partículas cilíndricas con diversas alturas por cristal. Los mapas de extinción obtenidos para las diferentes geometrías de partículas simuladas con el FEM se reportan en la Figura 4.12.

Realizando la comparación de los resultados tanto en función del método empleado (Figura 4.11) así como en función de la geometría de la partícula (Figura 4.12), se observa que en todos los casos se tiene un cruce de las RAs alrededor de la longitud de onda de 450 nm a incidencia normal. Más aún, es preciso notar que la degeneración de las difracciones se conserva independientemente de la forma de la partícula considerada en el cálculo con FEM. Esto se debe a que las difracciones son fenómenos colectivos originados de la propiedad de simetría de traslación de la red y la periodicidad del sistema coincide en ambos casos. No obstante, al comparar los resultados en la región de longitudes de onda corta es posible observar discrepancia entre ellos. Sin embargo, este resultado también era de esperarse, ya que de acuerdo a la distribución de carga de la partícula aislada (figura 4.7), el comportamiento de las partículas a longitudes onda corta es cuadrupolar, por lo que habrá efectos que no podrá reproducir el modelo CDM en este rango, dado que se basa en el modelo de los elementos del sistema bajo la aproximación de respuesta dipolar. Por lo tanto, la excelente concordancia entre los dos métodos demuestra que la respuesta de nuestras nanopartículas es predominantemente dipolar.

Por otra parte, como se observa en las gráficas de la Figura 4.12, la resonancia no dispersiva (banda horizontal ancha) cambia drásticamente con respecto a la forma de la partícula, aun cuando se trata únicamente de un cambio de altura en el caso de los cilindros. Como ya se había señalado, esto se debe a que esta resonancia se asocia particularmente al modo plasmónico del sistema, es decir, a la resonancia localizada debido al plasmón originado en la interfase de la partícula y el medio. Particularmente, se observa una buena similitud entre los espectros de la esfera y el cilindro con altura de 50 nm, esto se debe a que la fracción de llenado con respecto a la celda unitaria es muy parecida para estos dos casos. Esta última afirmación es de gran importancia para justificar la implementación de CDA para el estudio de sistemas experimentalmente fabricables,

4. SIMULACIÓN DE PROPIEDADES ÓPTICAS DE NANOESTRUCTURAS

ya que un cristal plasmónico de partículas cilíndricas conlleva una dificultad de fabricación mucho menor que un cristal plasmónico de partículas esféricas, razón por la cual en este trabajo se estudió el caso cilíndrico. Más aún, el interés de la implementación del CDA radica en la optimización de tiempos de cómputo, ya que este requiere de tiempos muchos más cortos, de hasta un orden de magnitud, con respecto al tiempo requerido para la convergencia de resultados usando FEM, aun cuando este último este optimizado por un software comercial, como es el caso de COMSOL. Por ejemplo, en el caso de los resultados reportados en este proyecto, el cálculo de cada uno de los mapas de extinción obtenido por FEM requirió de hasta 2 días y medio de tiempo de cómputo, mientras que el cálculo de un mapa de extinción por medio del CDA tardaba en promedio 3 horas.

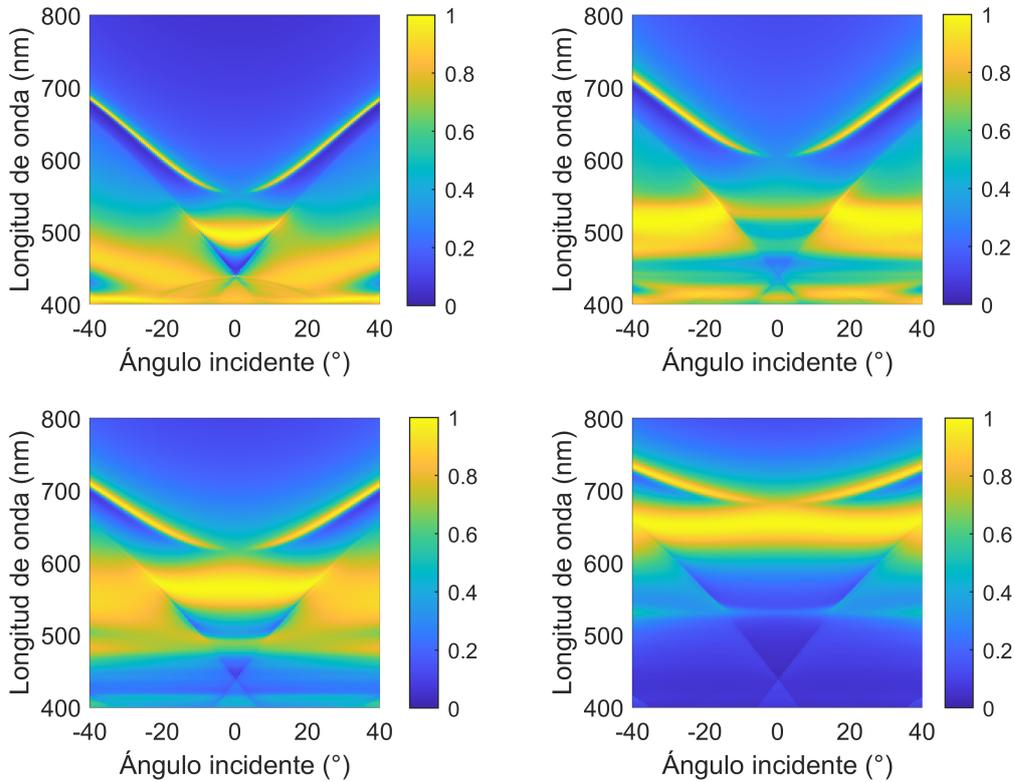


Figura 4.12: Mapa de extinción en función del ángulo de incidencia y de la longitud de onda incidente obtenido del cálculo numérico correspondientes a: (sup-izq) esfera $r = 50$ nm, (sup-der) cilindro $r = 50$ nm y $h = 100$ nm, (inf-izq) cilindro $r = 50$ nm y $h = 50$ nm, (inf-der) cilindro $r = 50$ nm y $h = 20$ nm

Por último, como se analizó de manera análoga en el caso de partícula aislada, una ventaja de la simulación del sistema usando el software COMSOL es la visualización del campo esparcido y de la densidad de carga en la superficie de las partículas de manera semi-automatizada. Consecuentemente, explotando este hecho, en la figura 4.13 se reporta el campo y distribución de carga, obtenidos del modelo numérico, para un ángulo de incidencia de 12° y longitud de onda de resonancia para cada caso en particular.

Los parámetros de ángulo de incidencia y longitud de onda analizados en la figura 4.13 son de interés debido a que son condiciones de resonancias de la banda que tiende a desaparecer

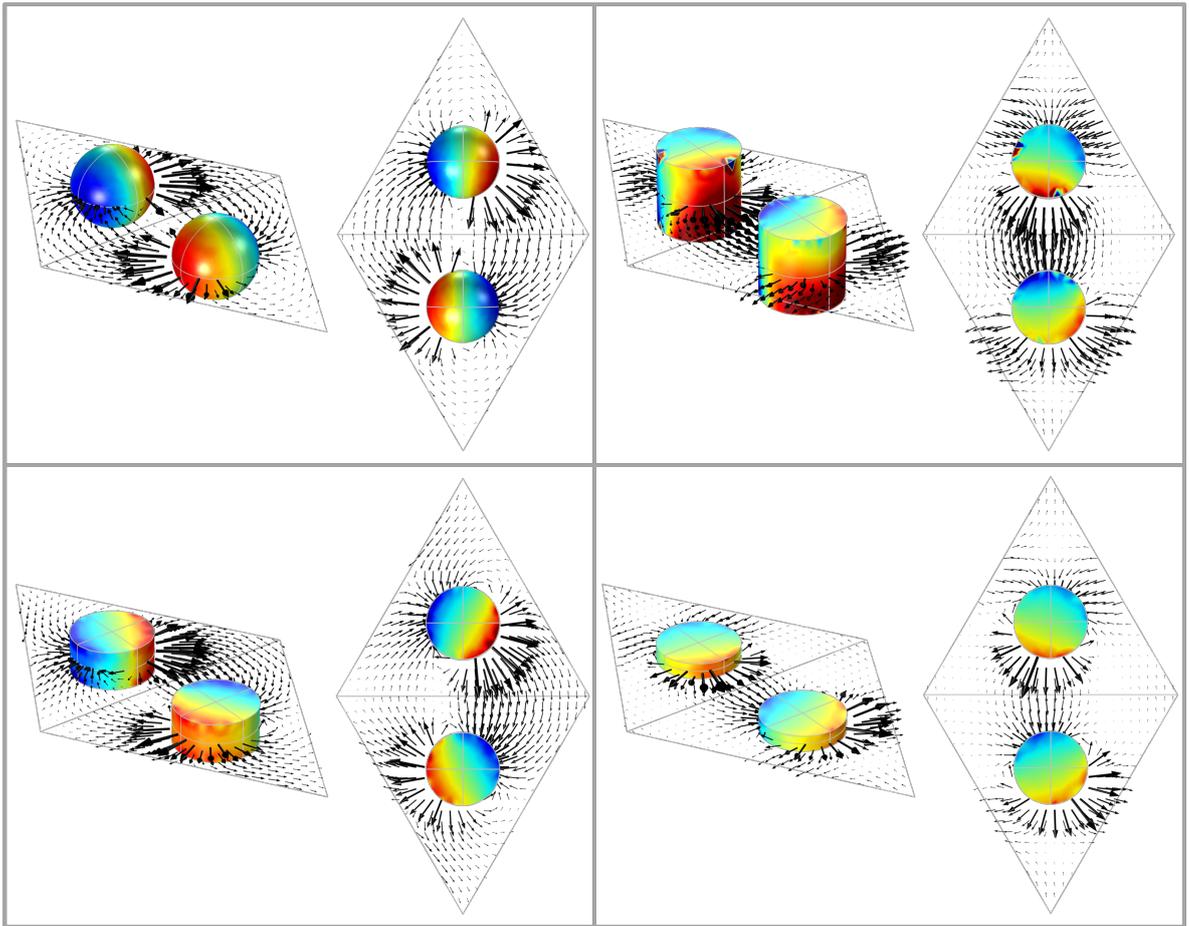


Figura 4.13: Visualización de la distribución de carga en la superficie de las partículas para un ángulo de incidencia de 12 y longitud de onda de resonancia respectiva para cada caso. (sup-izq) esfera $r = 50$ nm y $\lambda = 572$ nm; (sup-der) cilindro $r = 50$ nm, $h = 100$ nm y $\lambda = 628$ nm; (inf-izq) cilindro $r = 50$ nm, $h = 50$ nm y $\lambda = 618$ nm; (inf-der) cilindro $r = 50$ nm, $h = 20$ nm y $\lambda = 688$ nm.

alrededor de la incidencia normal (observar figuras 4.9 y 4.12). Estos modos están asociados a la interacción entre las subredes que conforman al sistema periódico, por lo que, en la literatura, se les conoce con el nombre de modos sub-radiativos. En particular, de la distribución de carga reportadas en el figura (4.13) se observa que el momento dipolar inducido en las partículas dentro de la celda unitaria, corresponden a dipolos paralelos, o semi paralelos para el caso de los cilindros, que poseen sentido contrario. Debido a esto, el momento dipolar neto es prácticamente cero. Este comportamiento se conserva alrededor de la incidencia normal, razón por la cual esta banda desaparece en esta región. Así, dado que esta transparencia en la respuesta del cristal plasmónico puede ser explotada en el diseño de dispositivos opto-electrónicos, el estudio de estos sistemas es activo en la actualidad. Por ejemplo, en la referencia [11] se analiza como emerge este fenómeno al cambiar la posición relativa entre las partículas de la base, es decir, las partículas dentro de la celda unitaria, demostrando que las resonancias de los cristales plasmónicos con una celda unitaria multipartícula están gobernadas por la tendencia de la matriz reticular. Esto último es mencionado debido a que el análisis, realizado en dicha referencia, se basa igualmente en el método de dipolos acoplados, por lo que corrobora la implementación del método desarrollado en este proyecto como una herramienta útil para la investigación de fenómenos de interés actual.

Conclusiones

En el presente trabajo, se implementó el método de dipolos acoplados en el estudio de la respuesta óptica de sistemas periódicos. Se diseñó y optimizó un código computacional (propio) para la implementación de CDA en el cálculo de los mapas de extinción de arreglos plasmónicos 2-dimensionales. Asimismo, se reporta el análisis de convergencia de la suma reticular requerida para la implementación del método CDA, para el cual se desarrolló y adaptó el método de Ewald.

El código computacional desarrollado en este trabajo es óptimo para estudiar la respuesta de cualquier cristal plasmónico, de tal manera que la descripción del sistema se caracteriza en función de parámetros tales como: el radio de las partículas, los vectores base y de red del cristal, el índice de refracción de las partículas y del medio en que se encuentran embebidas; así como de las propiedades de la luz incidente tales como tipo de polarización (s o p), ángulo de incidencia y longitud de onda.

Asimismo, en el presente trabajo se reportan las características generales del método de elemento finito (FEM) para el estudio de la respuesta óptica de sistemas nanométricos. Se reporta el procedimiento para construir modelos en el Software comercial COMSOL, junto con los parámetros óptimos para diseñar el modelo para partícula aislada y para el cristal plasmónico, de forma independiente.

Con base en el modelo de FEM para partícula aislada, se reporta la simulación de la respuesta óptica de nanopartículas aisladas embebida en un medio homogéneo. Con base en el análisis de la distribución de carga y campo eléctrico esparcido se comprobó una respuesta dipolar a longitudes de onda largas para partículas de diferentes geometrías y tamaños de cientos de nanómetros. Esto, a su vez, sirve como justificación en la implementación de la aproximación dipolar en el estudio de cristales plasmónicos.

En particular, en este proyecto se reportó el uso del código computacional desarrollado para el estudio de un cristal plasmónico con simetría de traslación hexagonal, formado por nanoesferas de plata, con radio de 50 nm. Asimismo, se reporta el modelo numérico implementando por medio del método de elemento finito (FEM) para el análisis del cristal hexagonal, considerando dos diferentes tipos de geometría de las nanopartículas. En un primer caso se consideraron esferas de 50 nm radio y, de manera independiente, para un segundo caso se consideran partículas cilíndricas de 50 nm de radio de base. Para la geometría cilíndrica se simuló diferentes alturas por cristal, las cuales corresponden a 100 nm, 50 nm y 20 nm. Tanto para el sistema con CDA como para el modelo con FEM, se consideró que el cristal estaba embebido en un medio de índice de refracción igual a 1.46 (silicio); y se fijó la distancia centro-centro entre vecinos cercanos a cuatro veces el radio de la partícula. Asimismo, cabe resaltar que, para todos los casos,

5. CONCLUSIONES

se enfocó el análisis de la respuesta óptica en la trayectoria de simetría Γ –K del espacio recíproco.

Comparando los resultados obtenidos mediante los diferentes métodos, se reporta una excelente concordancia entre los resultados obtenidos con el método semianalítico (CDA) y el método numérico (FEM). De esta manera, con base en la coincidencia de los espectros de extinción, se comprueba que las interacciones dipolares dominan la respuesta colectiva del cristal plasmónico.

Además, con base en los mapas de extinción de la respuesta del cristal plasmónico, al identificar la contribución de los modos plasmónicos (C_{sca} de partícula aislada) y la contribución de los modos fotónicos (condición de difracción del CDA), se comprueba la existencia de modos híbridos, es decir, se caracterizan las resonancias de red superficiales (SLRs) para el cristal plasmónico estudiado.

Del análisis de la respuesta del cristal en función de la geometría de las partículas que lo componen, se reporta la existencia de una resonancia de red superficial (SLR) que tiende a desaparecer alrededor de la incidencia normal, demostrado así la existencia de modos sub-radiativos para los cristales con simetría de traslación hexagonal y distancia entre dispersores de 200 nm. La interpretación física de este fenómeno se fundamentó con base en el análisis de la densidad de carga de las partículas, de donde se dedujo que el momento dipolar inducido en las dos partículas dentro de la celda unitaria forman dos dipolos paralelos, o semi-paralelos (cilindros), que poseen sentidos contrarios entre sí. De esta manera, el momento dipolar neto es nulo, produciéndose así la transparencia en la respuesta del cristal hexagonal estudiado, independientemente de la geometría de las partículas que lo componen.

De manera congruente, se deduce que los modos sub-radiativos generados son producidos por la disposición geométrica de las dos subredes triangulares no equivalentes, las cuales sostienen modos colectivos por separado. Por lo tanto, se confirma que la diferencia de fase adaptada entre los modos de red individuales en el campo cercano permite ajustar con precisión el espectro de extinción de la red completa y esto, a su vez, provoca modificaciones intrigantes de la dispersión del modo que aparecen con una incidencia fuera de lo normal. Cabe remarcar que todas estas características se deben enteramente a la interacción entre subredes y estas están bien descritas en nuestro modelo semianalítico, demostrando así el poder de predicción del formalismo reportado en este proyecto.

Como trabajo a futuro se propone abordar la expansión del método de CDA para el estudio de cristales plasmónicos soportados sobre un sustrato, donde la viabilidad del proyecto se debe a que el formalismo expuesto en esta tesis permite expandir al agregar un término extra a la función de Green usada en el desarrollo reportado, es decir, es posible expandir el formalismo del acoplamiento de dipolar para diferentes calificaciones de la función de Green diádica, como se abordó en este proyecto. Por otro lado, proponemos utilizar el código computacional desarrollado para explorar diferentes geometrías del cristal plasmónico, las cuales pueden englobar tanto el cambio de la simetría de traslación del cristal, como usarlo como base en el estudio de cristales apilados. Finalmente, del punto de vista experimental, se propone usar los resultados del modelo semianalítico para diseñar la absorción y la fluorescencia de moléculas emisoras de luz acopladas al cristal plasmónico.

Análisis temporal de la Teoría del Electromagnetismo

A.1. Función de Green dependiente del tiempo

Para comprender los diferentes comportamientos temporales asociados con $G_k^{(+)}$ y $G_k^{(-)}$ se necesita construir la **función de Green dependiente del tiempo**. Esto se puede hacer partiendo de las ecuaciones de Maxwell, en su forma original, y usando, de nuevo, el método de potenciales. De esta manera se puede obtener un número menor de ecuaciones de segundo orden que satisfacen idénticamente las ecuaciones de Maxwell. Particularmente, la Ley de Gauss magnética establece:

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{A.1})$$

de acuerdo a esta Ley, se puede definir a \mathbf{B} en términos de un vector potencial \mathbf{A}^0 por medio de la relación:

$$\boxed{\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}^0(\mathbf{r}, t)}, \quad (\text{A.2})$$

donde el super-índice 0 en la notación de \mathbf{A}^0 es para diferenciar el potencial de esta definición con respecto al potencial $\tilde{\mathbf{A}}$ definido en (2.32). Esta diferenciación entre ambos términos es necesario debido a que el potencial $\tilde{\mathbf{A}}$ fue definido en el espacio de frecuencias y con base en las ecuaciones derivadas de la aplicación de la Relaciones Constitutivas, mientras que el potencial \mathbf{A}^0 se ha definido en el espacio temporal.

Con base en (A.2) y la Ley de Faraday, la ecuación homogénea entre el campo eléctrico \mathbf{E} y el campo magnético \mathbf{B} puede ser escrita de la forma:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \Rightarrow \nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}^0}{\partial t} \right) = 0. \quad (\text{A.3})$$

El hecho de que la función en (A.3) se anule cuando se aplica el rotacional nos indica que la función puede escribirse como el gradiente de alguna función escalar conocido como escalar potencial Φ^0 :

$$\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}^0}{\partial t} = -\nabla \Phi^0,$$

donde, de manera análoga al caso del potencial vectorial, el super-índice 0 en la notación de Φ^0 es para diferenciar el potencial de esta definición con respecto al potencial $\tilde{\Phi}$ definido en (2.33).

A. ANÁLISIS TEMPORAL DE LA TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

De la definición anterior se puede reescribir de la forma:

$$\boxed{\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial\mathbf{A}^0}{\partial t}}, \quad (\text{A.4})$$

La definición de \mathbf{B} y \mathbf{E} en términos de los potenciales \mathbf{A}^0 y Φ^0 de acuerdo con (A.2) y (A.4) satisfacen idénticamente las dos ecuaciones de Maxwell homogéneas. El comportamiento dinámico de \mathbf{A}^0 y Φ^0 deberá ser determinado por las dos ecuaciones de Maxwell inhomogéneas.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho_{total}/\epsilon_0 &\Rightarrow -\nabla \cdot \left(\nabla\Phi^0 + \frac{\partial\mathbf{A}^0}{\partial t} \right) = \rho_{total}/\epsilon_0 \\ \boxed{\nabla^2\Phi^0 + \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \cdot \mathbf{A}^0) = -\rho_{total}/\epsilon_0} & \quad (\text{A.5}) \end{aligned}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0\mathbf{J} + \mu_0\epsilon_0 \frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} \Rightarrow \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}^0) = \mu_0\mathbf{J} - \mu_0\epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla\Phi^0 + \frac{\partial\mathbf{A}^0}{\partial t} \right),$$

usando la identidad $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}^0) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}^0) - \nabla^2\mathbf{A}^0$ y definiendo $c^2 = 1/\mu_0\epsilon_0$, se obtiene:

$$\boxed{\nabla^2\mathbf{A}^0 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\mathbf{A}^0}{\partial t^2} - \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A}^0 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial\Phi^0}{\partial t} \right) = \mu_0\mathbf{J}} \quad (\text{A.6})$$

Con los resultados en (A.5) y (A.6) hemos reducido el conjunto de las cuatro ecuaciones de onda de Maxwell a dos ecuaciones, que aún se encuentran acopladas. El desacoplamiento se puede lograr explotando la arbitrariedad involucrada en la definición de los potenciales.

Mientras \mathbf{B} está definido através de (A.2) en términos de \mathbf{A}^0 , el potencial vectorial es arbitrario al agregarle el gradiente de alguna función escalar Λ . Entonces \mathbf{B} se mantiene invariante ante transformaciones del estilo:

$$\mathbf{A}^0 \rightarrow (\mathbf{A}^0)' = \mathbf{A}^0 + \nabla\Lambda \quad (\text{A.7})$$

Para que el campo eléctrico dado por (A.4) se mantenga invariante ante la transformación (A.7), el potencial escalar deberá ser transformado simultáneamente,

$$\Phi^0 \rightarrow (\Phi^0)' = \Phi^0 - \frac{\partial\Lambda}{\partial t} \quad (\text{A.8})$$

La libertad implicadas en (A.7) y (A.8) significa que se puede elegir el conjunto de potenciales (\mathbf{A}^0, Φ^0) para satisfacer diferentes condiciones como la norma de Lorentz o la norma de Coulomb.

La transformación (A.7) y (A.8) es llamada *transformaciones de norma (gauge)*, y la invariancia de los campos bajo su transformación es llamada *invariancia de norma*. Una condición útil en la resolución de los campos electromagnéticos es la condición de Lorentz, la cual está dada por:

$$\boxed{\nabla \cdot \mathbf{A}^0 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\Phi^0}{\partial t^2} = 0.} \quad (\text{A.9})$$

Para mostrar que los potenciales siempre pueden satisfacer la condición de Lorentz, supongamos que los potenciales \mathbf{A}^0, Φ^0 que satisfacen (A.6) y (A.5) no satisfacen (A.9). Entonces realizaremos

una transformación de norma para los potenciales \mathbf{A}^0 , Φ^0 y imponemos que $(\mathbf{A}^0)'$, $(\Phi^0)'$ satisfagan la condición de Lorenz:

$$\nabla \cdot (\mathbf{A}^0)' + \frac{1}{c^2} \frac{\partial (\Phi^0)'}{\partial t} = 0 = \nabla \cdot \mathbf{A}^0 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \Phi^0}{\partial t} + \nabla^2 \Lambda - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2}$$

Por tanto, siempre que se pueda encontrar una función de calibre Λ que satisfaga:

$$\nabla^2 \Lambda - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2} = - \left(\nabla \cdot \mathbf{A}^0 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \Phi^0}{\partial t} \right)$$

los nuevo potenciales $(\mathbf{A}^0)'$, $(\Phi^0)'$ satisfacen la condiciones de Lorenz y las ecuaciones de onda (A.6) y (A.5) se simplifican de la forma

$$\boxed{\nabla^2 \Phi^0 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi^0}{\partial t^2} = -\rho_{total}/\epsilon_0} \quad (\text{A.10})$$

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{A}^0 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}^0}{\partial t^2} = -\mu_0 \mathbf{J}_{total}} \quad (\text{A.11})$$

Las ecuaciones (A.10) y (A.11) más (A.9) forman un conjunto de ecuaciones equivalentes en todos los aspectos a las ecuaciones de Maxwell en el vacío. De esta manera, el problema se resume a calcular $\Phi^0(\mathbf{r}, t)$ y $A_\alpha^0(\mathbf{r}, t)$, ($\alpha = 1, 2, 3$) para un conjunto de fuentes carga $\rho_{total}(\mathbf{r}, t)$ y fuentes de corriente $\mathbf{J}_{total}(\mathbf{r}, t)$ dados.

Las ecuaciones (A.10) y (A.11) tienen la misma estructura básica

$$\boxed{\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = -4\pi f(\mathbf{r}, t)}, \quad (\text{A.12})$$

donde $f(\mathbf{r}, t)$ es conocido como la distribución de fuentes. El factor c es la velocidad de propagación en el medio, asumido aquí para el caso sin dispersión. Para este tipo de ecuaciones, el método de la función de Green se ha desarrollado especialmente para resolver este tipo de ecuaciones de una forma bastante elegante. El método tiene una analogía en la teoría de circuitos mediante la cual la respuesta de una red a cualquier función de entrada puede determinarse mediante una integración basada en la respuesta de impulso de la red. La función de Green para un problema espacial juega el mismo papel que la función de respuesta de impulso en un problema en el dominio del tiempo. Para problemas de campos transitorios, la función de Green puede construirse para incluir también las características de tiempo impulsivo.

En primera instancia, para resolver (A.12) es útil considerar el caso simple sin superficies de fronteras y procedemos a remover la dependencia explícita en el tiempo al introducir una transformación de Fourier con respecto a la frecuencia. Suponemos que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $f(\mathbf{r}, t)$ la representación integral de Fourier:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \\ f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega. \end{array} \right\} \quad (\text{A.13})$$

A. ANÁLISIS TEMPORAL DE LA TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

Si la representación de Fourier es sustituida en la expresión (A.12) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \nabla^2(\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega)) e^{-i\omega t} d\omega - \frac{1}{\sqrt{2\pi}c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \frac{\partial^2}{\partial t^2} (e^{-i\omega t}) d\omega &= -\frac{4\pi}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \\ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\nabla^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \right] (e^{-i\omega t}) d\omega &= -4\pi \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \end{aligned}$$

multiplicando por $e^{i\omega' t}$ e integrando con respecto al tiempo de ambos lados de la igualdad se tiene:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega' t} dt \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\nabla^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \right] e^{-i\omega t} d\omega \right. &= \left. -4\pi \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \right\} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\nabla^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \right] \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega' - \omega)t} dt \right\} d\omega & \\ = -4\pi \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega' - \omega)t} dt \right\} d\omega & \end{aligned}$$

además, usando la definición de la delta de Dirac en su forma integral

$$\delta(\omega - \omega') = \delta(\omega' - \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega' - \omega)t} dt$$

se tiene que:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\nabla^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \right] \delta(\omega - \omega') d\omega &= -4\pi \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) \delta(\omega - \omega') d\omega \\ \nabla^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega') + \frac{(\omega')^2}{c^2} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega') &= -4\pi \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega') \end{aligned}$$

Por lo tanto, renombrando la variable $\omega' \rightarrow \omega$ y definiendo el número de onda k , se obtiene:

$$\boxed{\nabla^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) + k^2 \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) = -4\pi \tilde{f}(\mathbf{r}, \omega) \quad \text{donde } k = \frac{\omega}{c}}, \quad (\text{A.14})$$

para cada ω , donde, hasta el momento se permite cualquier conexión entre k y ω , aunque la causalidad impondrá algunas restricciones. A la ecuación dada en (A.14) se le conoce con el nombre de **Ecuación de Helmholtz**.

La **función de Green dependiente del tiempo** que satisface:

$$\boxed{\left(\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')} \quad (\text{A.15})$$

Para proceder introducimos la transformación de Fourier con respecto al tiempo t dada por:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') e^{-i\omega t} d\omega \quad (\text{A.16})$$

Si la representación de Fourier es sustituida en la expresión (A.15) se tiene:

$$\begin{aligned} & \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right)^{(-i\omega)^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') e^{-i\omega t} d\omega \right] = -4\pi \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underbrace{\left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i(t-t')\omega} \right]}_{\delta(t-t')} \\ \Rightarrow & \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\nabla^2 + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \right) \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') \right] e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[-\frac{4\pi}{2\pi} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i\omega t'} \right] e^{i\omega t} \end{aligned}$$

multiplicando por $e^{i\omega' t}$ e integrando con respecto al tiempo t de ambos lados de la igualdad se tiene:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\nabla^2 + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \right) \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') \right] \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega' - \omega)t}}_{2\pi\delta(\omega' - \omega)} \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[-\frac{4\pi}{2\pi} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i\omega t'} \right] \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega + \omega')t}}_{2\pi\delta(\omega + \omega')} \\ \Rightarrow & \sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\left(\nabla^2 + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \right) \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') \right] \delta(\omega' - \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[-4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i\omega t'} \right] \delta(\omega' + \omega) \\ \Rightarrow & \sqrt{2\pi} \left(\nabla^2 + \left(\frac{\omega'}{c} \right)^2 \right) \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\omega' t'} . \end{aligned}$$

Por lo tanto, renombrando la variable $\omega' \rightarrow \omega$ y definiendo el número de onda k , se obtiene:

$$\boxed{(\nabla^2 + k^2) \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{e^{i\omega t'}}{\sqrt{2\pi}} \quad \text{donde } k = \frac{\omega}{c}} \quad (\text{A.17})$$

Si comparamos las expresiones dadas en (2.45) y (A.15), se observa que el producto de incluir explícitamente la dependencia con respecto al tiempo t es la adición del término $\frac{e^{i\omega t'}}{\sqrt{2\pi}}$ del lado derecho en la ecuación de Helmholtz, por lo que el procedimiento para resolver la dependencia con respecto al espacio es análogo al expuesto en la sección de independencia temporal. En consecuencia y en relación a la sección anterior, la solución de la ecuación (A.17) está dada por:

$$\boxed{\tilde{G}^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') = G_k^{(\pm)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \frac{e^{i\omega t'}}{\sqrt{2\pi}}}, \quad (\text{A.18})$$

donde $G_k^{(\pm)}$ están dados de acuerdo a (2.69). Por lo tanto, para calcular la función de Green dependiente del tiempo es necesario calcular la transformada de Fourier en (A.16). Calculando

explícitamente se tiene:

$$\begin{aligned}
G^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{G}^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega, t') e^{-i\omega t} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\frac{e^{\pm i(\omega/c)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{e^{i\omega t'}}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-i\omega t} \\
&= \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i(t'-t \pm \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{c})\omega}}_{\delta(t'-t \pm \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{c})}.
\end{aligned}$$

Por lo tanto, usando que la función delta de Dirac es una función par, se obtiene:

$$\boxed{G^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \frac{1}{R} \delta\left(\tau \mp \frac{R}{c}\right)} \quad \text{donde } \tau = t - t' \quad \text{y} \quad R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|. \quad (\text{A.19})$$

Como se observa, para un medio no dispersivo donde $k = \omega/c$, la función de Green del espacio-infinito es entonces una función que solo depende de la distancia relativa R y del tiempo relativo τ entre la fuente y el punto de observación.

La función de Green $G^{(+)}$ es llamada la función de Green retardada porque exhibe el comportamiento casual asociado con una perturbación de la onda. El argumento de la función delta muestra que el efecto observado en el punto \mathbf{r} al tiempo t es causado por la acción de una fuente a una distancia R de distancia en un momento anterior o retardado $t' = t - R/c$. La diferencia de tiempo R/c es justamente el tiempo de propagación de la perturbación de un punto al otro. Similarmente, $G^{(-)}$ es llamada la función de Green avanzada.

Integrales particulares de la ecuación de onda no homogénea (A.12) son:

$$\Psi^{(\pm)} = \int \int G^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') f(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}' dt' \quad (\text{A.20})$$

Para especificar el problema físico por completo, soluciones de la ecuación homogénea puede agregarse a cualquiera de estos. Consideramos una distribución fuente $f(\mathbf{r}', t')$ que está localizada en el tiempo y el espacio. Es diferente de cero solo por un intervalo finito de tiempo alrededor de $t' = 0$. Se prevén dos situaciones limitantes. En el primero se supone que en el tiempo $t \rightarrow \infty$ existe una onda $\Psi_{in}(\mathbf{r}, t)$ que satisface la ecuación de onda homogénea. Esta onda se propaga en el tiempo y el espacio; la fuente se enciende y genera una onda propia. La solución completa para esta situación en todo momento es evidentemente

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_{in}(\mathbf{r}, t) + \int \int G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') f(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}' dt'. \quad (\text{A.21})$$

La presencia de $G^{(+)}$ garantiza que en tiempos t remotamente tempranos, antes de que se active la fuente, no haya contribución de la integral, solo de la onda de salida especificada por Ψ_{in} . La segunda situación es que en un tiempo remotamente tardío ($t \rightarrow +\infty$) la onda dada como $\Psi_{out}(\mathbf{r}, t)$ sea una solución conocida de la ecuación de onda homogénea. Entonces la solución completa para todos los tiempos es:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_{out}(\mathbf{r}, t) + \int \int G^{(-)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') f(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}' dt'. \quad (\text{A.22})$$

Ahora la función de Green avanzada asegura que que no existirá ninguna señal de la fuente después de que la fuente se apague (todas estas señales se incluyen, por supuesto, en Ψ_{out}).

La situación en física más común es la descrita en (A.21) con $\Psi_{in} = 0$. Algunas veces se inserta explícitamente la función de Green en (A.19) para reescribirlo como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{f(\mathbf{r}', t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta\left(t' + \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} - t\right). \quad (\text{A.23})$$

A.1.1. Solución de los potenciales electromagnéticos

Comparando la ecuación de onda en (A.12) con la ecuación de onda correspondientes a los potenciales escalar expuestos en las expresiones (A.10) y (A.11), se observa que para conservar la relación se tiene que:

$$f(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \rho_{total}(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\mu_0}{4\pi} \mathbf{J}_{total}(\mathbf{r}, t) \end{cases}.$$

Por lo tanto, usando la solución retardada mostrada en (A.23), la solución de los potenciales en la norma de Lorenz es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi^0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho_{total}(\mathbf{r}', t') \delta\left(t' + \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} - t\right) \\ \mathbf{A}^0(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathbf{J}_{total}(\mathbf{r}', t') \delta\left(t' + \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} - t\right), \end{array} \right\} \quad (\text{A.24})$$

siempre y cuando no se presente ninguna superficie límite. La función delta de Dirac asegura el comportamiento causal de los campos.

Si consideramos la distribución de carga representada por la función $\rho_{total}(\mathbf{r}, t)$ y la distribución de corriente representada por la función $\mathbf{J}_{total}(\mathbf{r}, t)$, y a sus transformadas de Fourier $\tilde{\rho}(\mathbf{r}, \omega)$ y $\tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{r}, \omega)$, respectivamente, estas estarán relacionados a través de las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \rho_{total}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}_{total}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \\ \mathbf{J}_{total}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\mathbf{J}}_{total}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Las expresiones anteriores pueden ser sustituidas en la solución de los potenciales dado en (A.24). En consecuencia, enfocándonos en la solución del potencial vectorial y realizando la sustitución antes mencionada se obtiene:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^0(\mathbf{r}, t) &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\mathbf{J}}_{total}(\mathbf{r}', \omega) e^{-i\omega t'} d\omega \right) \delta\left(t' + \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} - t\right) \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\tilde{\mathbf{J}}_{total}(\mathbf{r}', \omega)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-i\omega t'} \delta\left(t' + \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} - t\right) \right\} \\ &\Rightarrow \mathbf{A}^0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \tilde{\mathbf{J}}_{total}(\mathbf{r}', \omega) \frac{e^{i\frac{\omega}{c}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right\} e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

Comparando la expresión anterior con la expresión del potencial vectorial \mathbf{A} en términos de su

transformada de Fourier dado por:

$$\mathbf{A}^0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{\mathbf{A}}^0(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t},$$

se observa que:

$$\tilde{\mathbf{A}}^0(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \tilde{\mathbf{J}}_{total}(\mathbf{r}', \omega) \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad \text{donde } k = \omega/c, \quad (\text{A.26})$$

y de manera análoga se demuestra para el potencial escalar Φ se tienen

$$\tilde{\Phi}^0(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \tilde{\rho}_{total}(\mathbf{r}', \omega) \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad \text{donde } k = \omega/c. \quad (\text{A.27})$$

Es importante remarcar que los resultados obtenidos por la para la función Green independiente del tiempo en la ecuación (2.69) es exactamente la misma solución que se debe usar en la resolución de las ecuaciones (A.26) y (A.26). Esta observación es interesante de resaltar ya que el conjunto de ecuaciones se obtuvieron de maneras distintas. En este apéndice (A.26 - A.27), se obtuvieron de un análisis dependiente del tiempo de los potenciales $[\mathbf{A}^0(\mathbf{r}, t), \Phi^0(\mathbf{r}, t)]$ y, posteriormente, un análisis en el espacio de frecuencias al aplicar la transformada de Fourier sobre los mismos $[\tilde{\mathbf{A}}^0(\mathbf{r}, \omega), \tilde{\Phi}^0(\mathbf{r}, \omega)]$; mientras que el conjunto de ecuaciones obtenidas para los potenciales en el primer capítulo de este trabajo (2.41-2.42), se obtuvo de realizar el análisis de los campos eléctricos y magnéticos en el espacio de frecuencia $[\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega), \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega)]$ y, posteriormente, la aplicación de la relaciones constitutivas para la introducción de los potenciales $[\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega), \tilde{\Phi}(\mathbf{r}, \omega)]$. En consecuencia, para ambos procedimientos se comprueba que la deducción de la dependencia temporal, al ser analizado en el espacio de frecuencias, converge al caso estático; permitiendo así extrapolar los resultados clásicos del caso electrostático al caso de la electrodinámica, el cual suele ser más complejo de analizar. Sin embargo, es importante remarcar que aunque el procedimiento es análogo para ambas deducción, la diferencia radica en la descripción de las fuentes de campo. Es decir, en el caso de $\tilde{\mathbf{A}}^0$ las densidad de corriente, que funge como fuente del potencial vectorial, corresponde a la densidad de corriente total $\tilde{\mathbf{J}}_{total}$, en la cual se contemplan tanto fuentes externas como la fuentes inducidas en el material debido a la interacción con estímulos externos; mientras, que por otra parte, en el caso de $\tilde{\mathbf{A}}$ las densidad de corriente que funge como fuente del potencial vectorial corresponden a la densidad de corriente externa $\tilde{\mathbf{J}}$ en donde solo se contemplan las cargas externas, las cuales, cabe resaltar, son las cargas que se colocan de manera intencional para excitar al sistema y, así, poder observar su respuesta óptica.

En resumen, con base en las observaciones anteriores, se justifica la preferencia en el análisis derivado de $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$ en este trabajo, enfatizando su simplificación debido a la suposición de la aplicación de la relaciones constitutivas enunciadas en (2.18), (2.19) y (2.20), y su ventajosas implicaciones en la evasión de la descripción de las fuentes inducidas dentro de los materiales, los cuales no son accesibles por medio de procesos experimentales.

A.1.2. Forma integral de la ecuación de Schrödinger

La ecuación (A.12) para el caso en que $f(\mathbf{r}, \omega)$ es equivalente a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la presencia de un potencial constante está dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi, \quad (\text{A.28})$$

la cual podemos reescribir de la forma:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = Q, \quad (\text{A.29})$$

donde:

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{and} \quad Q \equiv \frac{2m}{\hbar^2}V\psi. \quad (\text{A.30})$$

Esta última expresión superficialmente tiene la forma de la ecuación de Helmholtz: nótese, sin embargo, que el término “no homogéneo” (Q) en sí depende de ψ , razón por la cual al comparar la ecuación (A.29) con la ecuación (2.40) observamos que $f(\mathbf{r}, \omega)$ para el caso de la ecuación de Schrödinger no es de nuestro conocimiento, como habíamos supuesto con anterioridad al proceder a usar el método de funciones de Green para la resolución del problema.

Ahora bien, omitiendo el detalle de la definición de $f(\mathbf{r}, \omega)$, la ecuación (A.29) se puede tratar como una ecuación de onda común y en consecuencia se puede resolver usando la función de Green dada en (2.69) y, dado que la k en este caso está relacionado con la energía total de la partícula, bajo ciertas consideraciones la ecuación de Helmholtz encuentra aplicaciones en el estudio de la dispersión de electrones en sólidos.

Ya que la función de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, dada en (2.69), resuelve la ecuación de onda, la forma más general de la ecuación integral de Schrödinger para un potencial de dispersión (scattering) debe ser:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'), \quad (\text{A.31})$$

donde es posible observar la analogía con la solución de las componentes del potencial vectorial.

A.2. Conservación de energía

Como se abordó en la sección 2.2 ecuaciones de Maxwell establecidas en (2.1)-(2.3) describen el comportamiento de los campos eléctricos y magnéticos, los cuales son una consecuencia directa de las propiedades de la materia. Sin embargo, aunque los campos eléctricos y magnéticos se postularon inicialmente para explicar las fuerzas de las leyes de Coulomb y Amperè, la ecuaciones de Maxwell no brindan ninguna información sobre la energía o las fuerzas en un sistema, como comenta Novotny en la referencia [22]. Citando *La ley básica de Lorentz describe las fuerzas que actúan solo sobre cargas en movimiento. Como muestra la controversia de Abraham-Minkowski, las fuerzas que actúan sobre un cuerpo arbitrario no pueden extraerse de un campo electromagnético dado de manera consistente*. Con base en este comentario, el autor enfatiza el hecho de que las leyes de Coulomb y Amperè fueron suficientes para establecer la ley de Fuerza de Lorentz. Si bien las ecuaciones del campo se completaron posteriormente agregando la corriente de desplazamiento de Maxwell, la ley de Lorentz permaneció sin cambio.

A. ANÁLISIS TEMPORAL DE LA TEORÍA DEL ELECTROMAGNETISMO

Ahora bien, dado que existe menos controversia con respecto a la energía, es recomendable estudiar la respuesta en términos de esta cantidad. Aunque tampoco es consecuencia directa de las ecuaciones de Maxwell, el teorema de Poynting proporciona una relación plausible entre el campo electromagnético y su contenido de energía. Para deducir este teorema, partimos de las ecuaciones (2.1)-(2.3) para obtener que:

$$\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) = \mathbf{H} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) = -\mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \vec{J} \cdot \mathbf{E}.$$

De esta manera, integrando sobre todo el espacio y usando el Teorema de Gauss se obtiene:

$$\int_{\partial V} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{n} da = - \int_V \left[\mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \vec{J} \cdot \mathbf{E} \right] dV \quad (\text{A.32})$$

Aunque esta ecuación ya forma la base del teorema de Poynting, se proporciona más información cuando se sustituyen \mathbf{B} y \mathbf{D} en términos de los campos vectoriales del material \mathbf{P} y \mathbf{M} , es decir, por las ecuaciones (2.8) y (2.9). Consecuentemente, la ecuación (A.32) se reescribe de la forma:

$$\begin{aligned} \int_{\partial V} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{n} da + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int_V [\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}] dV \\ = - \int_V \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} dV - \frac{1}{2} \int_V \left[\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} - \mathbf{P} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right] dV - \frac{\mu_0}{2} \int_V \left[\mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} - \mathbf{M} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \right] dV. \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Dado que esta ecuación es una conclusión de las ecuaciones de Maxwell y por lo tanto la validez del Teorema de Poynting se considera una interpretación de las ecuaciones de Maxwell. Este resultado afirma que el primer término es igual al flujo de energía neto en el volumen V , el segundo término es igual a la tasa de cambio en el tiempo de la energía electromagnética dentro de V y los términos restantes del lado derecho son iguales a la tasa de disipación de energía dentro de V . De acuerdo con esta interpretación:

$$\mathbf{S} = (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \quad (\text{A.34})$$

representa la densidad de flujo de energía y

$$W = \frac{1}{2} [\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}] \quad (\text{A.35})$$

es la densidad de energía electromagnética. Si el medio dentro de V es lineal, los dos últimos términos son iguales a cero y el único término que explica la disipación de energía es $\mathbf{J} \cdot \mathbf{E}$. Por lo tanto, los dos últimos términos se pueden asociar con pérdidas no lineales. El vector \mathbf{S} se denota como el vector de Poynting. En principio, el rotacional de cualquier campo vectorial se puede sumar a \mathbf{S} sin cambiar la ley de conservación (A.33), pero es conveniente hacer la elección como se indica en (A.34). Observe que la corriente \mathbf{J} en la ecuación (A.33) es la corriente asociada con la disipación de energía y, por lo tanto, no incluye las corrientes de polarización y magnetización. De especial interés es el valor medio de tiempo de \mathbf{S} . Esta cantidad describe la densidad de flujo de potencia neta y es necesaria para la evaluación de patrones de radiación. Suponiendo que los campos son armónicos en el tiempo y que los medios son lineales, el promedio de tiempo de la ecuación (A.33) se convierte en:

$$\int_V \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{n} da = \frac{1}{2} \int_V \text{Re} [\mathbf{J}^* \cdot \mathbf{E}] dV \quad (\text{A.36})$$

Un caso especial que se puede estudiar es el relacionado con el campo lejano, para esto, como punto de partida, retomaremos el análisis realizado en secciones 3.2.2.1 y 3.2.2.2. Particularmente, de las ecuaciones (3.16), (3.21) y (3.22), sabemos que la expansión multipolar de los campos está dada por: Con base en estas expresiones se pueden dar aproximaciones bastante simples para

Multipolo Eléctrico	Multipolo magnético
$E_r = n(n+1)\frac{1}{r}h_n^{(1)}Y_n^m$	$E_r = 0$
$E_\theta = \frac{1}{r}\frac{d}{dr}(rh_n^{(1)})Y_n^m$	$E_\theta = -kmh_n^{(1)}\frac{Y_n^m}{\sin\theta}$
$E_\varphi = im\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(rh_n^{(1)})\frac{Y_n^m}{\sin\theta}$	$E_\varphi = -ikh_n^{(1)}\frac{\partial}{\partial\theta}Y_n^m$
$H_r = 0$	$H_r = n(n+1)\frac{1}{r}h_n^{(1)}Y_n^m$
$H_\theta = kmh_n^{(1)}\frac{Y_n^m}{\sin\theta}$	$H_\theta = \frac{1}{r}\frac{d}{dr}(rh_n^{(1)})Y_n^m$
$H_\varphi = ikh_n^{(1)}\frac{\partial}{\partial\theta}Y_n^m$	$H_\varphi = im\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(rh_n^{(1)})\frac{Y_n^m}{\sin\theta}$

Tabla A.1: Descripción multipolar de los campos en términos de sus componentes esféricas

los campos multipolares a grandes distancias del origen. Ignorando los términos de orden $1/r^2$ y recordando que $h_n^{(1)}(x)$ es asintóticamente igual a $(-i)^n e^{ix}/x$ cuando $x \rightarrow \infty$, encontramos fácilmente para el multipolos eléctricos

$$\begin{aligned}\vec{E} &\sim (-i)^n \frac{e^{ikr}}{r} \left\{ \frac{\partial Y_n^m}{\partial\theta} \hat{\theta} + \frac{im}{\sin\theta} Y_n^m \hat{\varphi} \right\} = (-i)^n e^{ikr} \nabla Y_n^m \\ \vec{H} &\sim (-i)^n \frac{e^{ikr}}{r} \left\{ \frac{\partial Y_n^m}{\partial\theta} \hat{\theta} - \frac{im}{\sin\theta} Y_n^m \hat{\varphi} \right\} = (-i)^n e^{ikr} (\hat{r} \times \nabla Y_n^m),\end{aligned}$$

por lo que se obtiene que el vector \hat{r} y los campos vectoriales \vec{E} , \vec{H} , evaluados en dicho punto, forman una tríada ortogonal dextrógira. Además, las mismas aproximaciones se pueden usar para el multipolar magnético, por lo que este resultado es general. De esta manera, en el campo lejano, el campo electromagnético es puramente transversal. De esta manera el campo eléctrico y magnético están en fase y la relación de sus amplitudes es constante. En este caso, $\langle \mathbf{S} \rangle$ puede expresarse solo por el campo eléctrico como

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} |\mathbf{E}|^2 \hat{\mathbf{n}}_r, \quad (\text{A.37})$$

donde $\hat{\mathbf{n}}_r$ representa al vector unitario en la dirección radial y el inverso de la raíz cuadrada denota la impedancia de la onda.

Apéndice B

Análisis Diádico

En términos de la notación, la definición de las funciones vectoriales denotadas por:

$$\vec{F}_j = \sum_j F_{ij} \hat{x}_i \quad \Rightarrow \quad \vec{F}_1 \longrightarrow F_{i1} \sim \begin{bmatrix} F_{11} \\ F_{21} \\ F_{31} \end{bmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \hat{x}_1 \\ \leftarrow \hat{x}_2 \\ \leftarrow \hat{x}_3 \end{matrix}$$

donde se ha hecho explícito que la notación nos induciría a tratar de interpretar los índices del escalar F_{ij} en términos de la notación matricial ($i \leftarrow$ renglón, $j \leftarrow$ columna). Con base en la definición anterior, si yuxtaponemos un vector unitario \hat{x}_j de lado derecho de las funciones vectoriales \vec{F}_j y sumamos con respecto a j , al resultado lo definimos como las funciones diádicas \overleftarrow{F} , dado por:

$$\overleftarrow{F} = \sum_j \vec{F}_j \otimes \hat{x}_j = \sum_i \sum_j F_{ij} \hat{x}_i \otimes \hat{x}_j, \quad (\text{B.1})$$

definición que en términos de la notación de índices matricial, nos lleva a pensar en la forma:

$$\overleftarrow{F} \longrightarrow F_{ij} \sim \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{bmatrix} \longleftarrow \begin{bmatrix} (\hat{x}_1 \otimes \hat{x}_1) & (\hat{x}_2 \otimes \hat{x}_1) & (\hat{x}_3 \otimes \hat{x}_1) \\ (\hat{x}_1 \otimes \hat{x}_2) & (\hat{x}_2 \otimes \hat{x}_2) & (\hat{x}_3 \otimes \hat{x}_2) \\ (\hat{x}_1 \otimes \hat{x}_3) & (\hat{x}_2 \otimes \hat{x}_3) & (\hat{x}_3 \otimes \hat{x}_3) \end{bmatrix}.$$

Sin embargo, un punto muy importante es que una diada por sí misma, como una matriz, no tiene propiedad algebraica, por lo que se debe evitar pensar en operarla como matriz. No obstante, la diada, como matriz, desempeña el papel de un operador cuando se forman ciertos productos. Por esto a continuación definiremos tales operaciones de producto.

Producto escalar $() \cdot ()$	
Anterior: $\vec{a} \cdot \overleftarrow{F}$	Posterior: $\overleftarrow{F} \cdot \vec{a}$
$\vec{a} \cdot \overleftarrow{F} = \sum_j (\vec{a} \cdot \vec{F}_j) \otimes \hat{x}_j$ $\Rightarrow \vec{a} \cdot \overleftarrow{F} = \sum_i \sum_j a_i F_{ij} \hat{x}_j$	$\overleftarrow{F} \cdot \vec{a} = \sum_j \vec{F}_j \otimes (\vec{a} \cdot \hat{x}_j) = \sum_i \sum_j a_j F_{ij} \hat{x}_i$ $\Rightarrow \overleftarrow{F} \cdot \vec{a} = \sum_j \sum_i a_i F_{ji} \hat{x}_j$
Producto vectorial $() \times ()$	
Anterior: $\vec{a} \times \overleftarrow{F}$	Posterior: $\overleftarrow{F} \times \vec{a}$
$\vec{a} \times \overleftarrow{F} = \sum_{j=1}^3 (\vec{a} \times \vec{F}_j) \otimes \hat{x}_j$	$\overleftarrow{F} \times \vec{a} = \sum_{j=1}^3 \vec{F}_j \otimes (\vec{a} \times \hat{x}_j)$

Tabla B.1: Definición de productos diádicos

B. ANÁLISIS DIÁDICO

Es importante remarcar que, en general, el producto escalar anterior y posterior no son iguales. Para encontrar una relación entre los productos escalares, es conveniente definir la *transpuesta* de una función diada \overleftrightarrow{F} , la cual denotaremos por $\left(\overleftrightarrow{F}\right)^T$; con base en (B.1), se define la diada transpuesta por medio de:

$$\boxed{\left(\overleftrightarrow{F}\right)^T = \sum_j \hat{x}_j \overleftrightarrow{F}_j = \sum_i \sum_j F_{ij} \hat{x}_j \otimes \hat{x}_i = \sum_j \sum_i F_{ji} \hat{x}_i \otimes \hat{x}_j}. \quad (\text{B.2})$$

De esta manera, con base en la definición de la diada transpuesta y partiendo de la definición del producto escalar (B.1), es posible de mostrar que para cualquier diada \overleftrightarrow{F} se cumple la relación:

$$\boxed{\vec{a} \cdot \left(\overleftrightarrow{F}\right)^T = \overleftrightarrow{F} \cdot \vec{a}}. \quad (\text{B.3})$$

En particular, si definimos una diada simétrica \overleftrightarrow{F}_S de tal manera que cumpla con la propiedad $F_{ji} = F_{ij}$, entonces se cumple que:

$$\left(\overleftrightarrow{F}_S\right)^T = \overleftrightarrow{F}_S \quad \Rightarrow \quad \vec{a} \cdot \overleftrightarrow{F}_S = \overleftrightarrow{F}_S \cdot \vec{a}, \quad (\text{B.4})$$

mientras que, para un diada antisimétrica \overleftrightarrow{F}_A , que se caracteriza por $F_{ji} = -F_{ij}$, se cumple que:

$$\left(\overleftrightarrow{F}_A\right)^T = -\overleftrightarrow{F}_A \quad \Rightarrow \quad \vec{a} \cdot \overleftrightarrow{F}_A = \overleftrightarrow{F}_A \cdot \vec{a}. \quad (\text{B.5})$$

Entonces, como se comprueba, para las diadas simétricas el producto escalar anterior y posterior es el mismo, mientras que para las diadas antisimétricas solo difieren por un signo. Por lo tanto, en caso de que las diadas con las que trabajemos cumplan propiedad de simetría o antisimetría, se podrá usar el producto escalar de manera análoga que el análisis vectorial. En particular, existe una diada simétrica de suma importancia en el análisis diádico, de tal importancia que lleva por nombre **factor de ídem o identidad**, el cual se denota por \overleftrightarrow{I} y se define por medio de:

$$\overleftrightarrow{I} = \delta_{ij} \hat{x}_i \otimes \hat{x}_j, \quad (\text{B.6})$$

donde δ_{ij} representa la delta de kronecker, de tal manera que se comprueba que:

$$\boxed{\vec{a} \cdot \overleftrightarrow{I} = \overleftrightarrow{I} \cdot \vec{a} = \vec{a}}, \quad (\text{B.7})$$

razón por la cual, a la diada \overleftrightarrow{I} se nombra identidad.

Por otra parte, del análisis vectorial sabemos que existen algunas identidades que se siguen de la definición del producto entre vectores. Por ejemplo, una identidad usada en el análisis vectorial es la siguiente identidad en términos de un triple producto de vectores

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b} \cdot (\vec{c} \times \vec{a}) = \vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

Ahora bien, dado que el producto en términos de diadas involucra el producto común entre

vectores, la identidad anterior puede ser usada para generalizada el producto diádico definido en B.1. Para este propósito, consideremos tres conjuntos de productos triples con tres diferentes funciones vectoriales \vec{c}_j , esto es:

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}_j) = -\vec{b} \cdot (\vec{a} \times \vec{c}_j) = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}_j \quad \text{con } j = (1, 2, 3). \quad (\text{B.8})$$

En la relación anterior se puede observar que colocamos la función \vec{c}_j en la posición posterior, esto con el propósito de derivar las identidades diádicas deseadas. Ahora, si yuxtaponemos un vector unitario \hat{x}_j en la posición posterior de cada término en (B.8) y sumamos las ecuaciones resultantes con respecto a j , se obtiene:

$$\begin{aligned} & \sum_j \{ \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}_j) = -\vec{b} \cdot (\vec{a} \times \vec{c}_j) = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}_j \} \otimes \hat{x}_j \\ & \Rightarrow \{ \vec{a} \cdot (\vec{b} \times [\sum_j \vec{c}_j]) = -\vec{b} \cdot (\vec{a} \times [\sum_j \vec{c}_j]) = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot [\sum_j \vec{c}_j] \} \otimes \hat{x}_j \\ & \Rightarrow \vec{a} \cdot (\vec{b} \times [\sum_j \vec{c}_j \otimes \hat{x}_j]) = -\vec{b} \cdot (\vec{a} \times [\sum_j \vec{c}_j \otimes \hat{x}_j]) = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot [\sum_j \vec{c}_j \otimes \hat{x}_j] \\ \Rightarrow & \boxed{ \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \overleftarrow{c}_j) = -\vec{b} \cdot (\vec{a} \times \overleftarrow{c}_j) = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \overleftarrow{c}_j }, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

donde se ha hecho explícito que el producto $\otimes \hat{x}_j$ puede ingresar en cualquier posición dentro de cada expresión, con el único detalle de conservarlo dentro del argumento de la suma j . En consecuencia, la observación anterior nos hace pensar al resultado de la yuxtaposición como un producto realizado con un “ente” matemático que viven otro espacio. Ahora bien, la relación (B.9) nos a permitido elevar el producto triple vectorial a un nivel más alto, el cual involucra diadas y dos vectores. Es importante observar que, mientras cada término de (B.8) resulta en un escalar, cada término de (B.9) resulta en un vector. Más aún, con base en el carácter vectorial de los términos de (B.9), se puede elevar la carácter de la función \vec{b} en los últimos dos términos de (B.9), de tal manera que \vec{b} posea característica de diada. Para lograr lo anterior, solo es necesario considerar tres ecuaciones distintas de \vec{b} , es decir, considerar \vec{b}_j , de tal forma que:

$$-(\vec{a} \times \overleftarrow{c}_j)^T \cdot \vec{b}_j = (\overleftarrow{c}_j)^T \cdot (\vec{a} \times \vec{b}_j) \quad \text{con } j = (1, 2, 3).$$

Entonces, de manera análoga al caso anterior, si yuxtaponemos un vector unitario \hat{x}_j de lado derecho de la expresión obtenida, y sumamos la ecuación resultante con respecto al índice j , se obtiene:

$$\begin{aligned} & \sum_j \{ -(\vec{a} \times \overleftarrow{c}_j)^T \cdot \vec{b}_j = (\overleftarrow{c}_j)^T \cdot (\vec{a} \times \vec{b}_j) \} \otimes \hat{x}_j \\ & \Rightarrow -(\vec{a} \times \overleftarrow{c}_j)^T \cdot [\sum_j \vec{b}_j \otimes \hat{x}_j] = (\overleftarrow{c}_j)^T \cdot (\vec{a} \times [\sum_j \vec{b}_j \otimes \hat{x}_j]) \\ \Rightarrow & \boxed{ -(\vec{a} \times \overleftarrow{c}_j)^T \cdot \overleftarrow{b} = (\overleftarrow{c}_j)^T \cdot (\vec{a} \times \overleftarrow{b}) }. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Cada término obtenido corresponde a un producto escalar entre dos diadas, dando así resultado a una identidad entre dos diadas.

Por otra parte, de igual manera en que se definió las operaciones algebraicas en el análisis diádico, es necesario introducir algunas definiciones y fórmulas que involucren la operación de derivadas e integración sobre funciones diádicas. Las definiciones para las operaciones diferenciales se presentan en la tabla B.2.

B. ANÁLISIS DIÁDICO

Operaciones Diferenciales	
Divergencia	$\nabla \cdot \overleftarrow{F} = \sum_j (\nabla \cdot \vec{F}_j) \hat{x}_j = \sum_i \sum_j \frac{\partial F_{ij}}{\partial x_i} \hat{x}_j \quad \leftarrow \text{función vector.}$
Rotacional	$\nabla \times (F_{ij} \hat{x}_j) = \nabla F_{ij} \times \hat{x}_j$ $\nabla \times \overleftarrow{F} = \sum_j (\nabla \times \vec{F}_j) \hat{x}_j = \sum_i \sum_j (\nabla F_{ij} \times \hat{x}_i) \otimes \hat{x}_j \quad \leftarrow \text{función diádica.}$
Gradiente	$\nabla \vec{F} = \sum_j (\nabla F_j) \hat{x}_j = \sum_i \sum_j \frac{\partial F_j}{\partial x_i} \hat{x}_i \otimes \hat{x}_j \quad \leftarrow \text{función diádica.}$

Tabla B.2: Definiciones de operaciones diferenciales sobre funciones diádicas y vectores

De manera particular, cuando la función diádica \overleftarrow{F} es construida por medio del producto de la diada identidad \overleftarrow{I} y de una funciones escalar f , es decir, $\overleftarrow{F} = f \overleftarrow{I}$. Para este caso, las definiciones de las operaciones diferenciales se simplifican, como se muestra en la tabla B.3.

$\overleftarrow{F} = f \overleftarrow{I}$	
$\nabla \cdot \overleftarrow{F} = \nabla \cdot (f \overleftarrow{I}) = \sum_i \nabla \cdot (f \hat{x}_i) \hat{x}_i = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \hat{x}_i$	$\Rightarrow \nabla \cdot \overleftarrow{F} = \nabla f$
$\nabla \times \overleftarrow{F} = \nabla \times (f \overleftarrow{I}) = \sum_i \nabla \times (f \hat{x}_i) \hat{x}_i = \sum_i (\nabla f \times \hat{x}_i) \hat{x}_i$	$\Rightarrow \nabla \times \overleftarrow{F} = \nabla f \times \overleftarrow{I}$.

Tabla B.3: Definiciones de operaciones diferenciales sobre función diádica definida por medio de una función escalar

Una vez que hemos definido la divergencia y el rotacional de un función diádica, uno puede elevar los Teoremas de Green del análisis vectorial al análisis diádico. Para esto, consideremos un conjunto de vectores \vec{Q}_j con $j = (1, 2, 3)$, a los cuales le aplicaremos el Teoremas de Green de primer tipo, les yuxtapondremos el vector unitario \hat{x}_j y los sumaremos con respecto j , obteniendo así el **Teorema de Green diádico de primer tipo**:

$$\sum_j \left\{ \iiint_V [(\nabla \times \vec{P}) \cdot (\nabla \times \vec{Q}_j) - \vec{P} \cdot \nabla \times \nabla \times \vec{Q}_j] dV = \iint_S \hat{n} \cdot (\vec{P} \times \nabla \times \vec{Q}_j) dS \right\} \otimes \hat{x}_j, \quad j=1,2,3$$

$$\boxed{\iiint_V [(\nabla \times \vec{P}) \cdot (\nabla \times \overleftarrow{Q}_j) - \vec{P} \cdot \nabla \times \nabla \times \overleftarrow{Q}_j] dV = \iint_S \hat{n} \cdot (\vec{P} \times \nabla \times \overleftarrow{Q}_j) dS}, \quad (\text{B.11})$$

De manera similar, aunque un poco más elaborada, se puede elevar el Teorema de Green de segundo tipo, obteniéndose, en primera instancia el **Teorema de Green vector-diada de segundo tipo**, dado por:

$$\begin{aligned} & \iiint_V \left[\vec{P} \cdot \nabla \times \nabla \times \overleftarrow{Q} - (\nabla \times \nabla \times \vec{P}) \cdot \overleftarrow{Q} \right] dV \\ & = - \iint_S \hat{n} \cdot \left[\vec{P} \times \nabla \times \overleftarrow{Q} + (\nabla \times \vec{P}) \times \overleftarrow{Q} \right] dS \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

y posteriormente, el **Teorema de Green diada-diada de segundo tipo** dado por:

$$\begin{aligned} & \iiint_V \left[(\nabla \times \nabla \times \overleftarrow{Q})^T \cdot \overleftarrow{P} - (\overleftarrow{Q})^T \cdot \nabla \times \nabla \times \overleftarrow{P} \right] dV \\ &= - \oiint_S \left[(\overleftarrow{Q})^T \cdot (\hat{n} \times \nabla \times \overleftarrow{P}) + (\nabla \times \overleftarrow{Q})^T \cdot (\hat{n} \cdot \overleftarrow{P}) \right] dS. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Estos teoremas son necesarios para integrar las ecuaciones de Maxwell usando funciones de Green diádicas y para probar las propiedades simétricas de las funciones de Green diádicas.

B.1. Método Algebraico

Para abordar la solución de la función de Green diádica en términos de la expansión multipolar, se puede partir directamente de la función de Green scalar expandida en términos de coordenadas esféricas. A este método se le llama le conoce como el método algebraico. Para esto partimos de que las soluciones de la ecuación de Helmholtz escalar permiten resolver los campos vectoriales eléctrico y magnético por medio del método de potenciales. Entonces, retomando los resultados en (2.71), (2.78) y (2.97), sabemos que la función de Green de la ecuación de Helmholtz escalar en el espacio libre (2.45) está dada por:

$$\begin{aligned} G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= ik \sum_n^\infty D_{mn} j_n(kr_<) h_n^{(1)}(kr_>) \sum_{m=-l}^l Y_n^m(\theta, \varphi) Y_n^{m*}(\theta', \varphi') \\ &= \frac{ik}{4\pi} \sum_{n=1}^\infty \sum_{m=0}^n D_{mn} P_n^m(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta') \cos[m(\varphi - \varphi')] j_n(kr_<) h_n^{(1)}(kr_>), \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

donde se ha usado la definición de los armónicos esféricos (2.73) para obtener:

$$D_{mn} = (2 - \delta_0)(2n + 1) \frac{(n - m)!}{(n + m)!} \quad \text{con} \quad \delta_0 = \begin{cases} 1, & m = 0 \\ 0, & m \neq 0 \end{cases}.$$

Ahora bien, del análisis en la sección 2.5.2, sabemos que la función de Green escalar enunciada en la ecuación diádica en el espacio libre se puede escribir de la forma:

$$\overleftarrow{G}_{e;k}(\vec{r}, \vec{r}') = \vec{G}_k^{(x)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{x} + \vec{G}_k^{(y)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{y} + \vec{G}_k^{(z)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{z}, \quad (\text{B.15})$$

donde:

$$\vec{G}_k^{(c)}(\vec{r} - \vec{r}') = \left(1 + \frac{1}{k^2} \nabla(\nabla \cdot) \right) [G_k(\vec{r} - \vec{r}') \hat{c}], \quad \hat{c} = \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}. \quad (\text{B.16})$$

Ahora bien, para el caso en que $\vec{r} \neq \vec{r}'$, por medio de notación de índices se puede demostrar que:

$$\vec{G}_k^{(c)} = \frac{1}{k^2} \nabla \times \nabla \times [G_k(\vec{r}, \vec{r}') \hat{c}] \quad (\text{B.17})$$

Por lo tanto, sustituyendo la expresión (B.14) dentro de la expresión (B.17), para $r < r'$ se

B. ANÁLISIS DIÁDICO

obtiene:

$$\begin{aligned}\vec{G}_k^{(c)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{k^2} \nabla \times \nabla \times \left[\frac{ik}{4\pi} \sum_{m,n} D_{mn} P_n^m(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta') \cos [m(\varphi - \varphi')] j_n(kr) h_n^{(1)}(kr') \hat{c} \right] \\ &= \frac{ik}{4\pi} \sum_{m,n} D_{mn} h_n^{(1)}(kr') P_n^m(\cos \theta') \frac{\cos(m\varphi')}{\sin(m\varphi')} \left\{ \frac{1}{k^2} \nabla \times \nabla \left[j_n(kr) P_n^m(\cos \theta) \frac{\cos(m\varphi)}{\sin(m\varphi)} \hat{c} \right] \right\}.\end{aligned}$$

Reescribiendo la expresión de la forma

$$\vec{G}_k^{(c)}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{k^2} \sum_{mn} A_{e_{mn}}(k) \vec{N}_{e_{mn}}^{(c)}(k), \quad (\text{B.18})$$

donde se han definido las funciones

$$A_{e_{mn}}(k) = D_{mn} P_n^m(\cos \theta') h_n^{(1)}(kr') \frac{\cos(m\varphi')}{\sin(m\varphi')} \quad (\text{B.19})$$

$$\vec{N}_{e_{mn}}^{(c)}(k) = \frac{1}{k} \nabla \times \vec{M}_{e_{mn}}^{(c)}(k) \quad (\text{B.20})$$

$$\vec{M}_{e_{mn}}^{(c)}(k) = \frac{1}{k} \nabla \times \left[\psi_{e_{mn}}(k) \hat{c} \right] \quad (\text{B.21})$$

$$\psi_{e_{mn}}(k) = P_n^m(\cos \theta) j_n(kr) \frac{\cos(m\varphi)}{\sin(m\varphi)} \quad (\text{B.22})$$

Ahora podemos expresar las funciones de (B.20) y (B.21) en términos de funciones de onda vectoriales esféricas radiales. Para esto es necesario sustituir en (B.21) los vectores unitarios como funciones de las coordenadas esféricas, como por ejemplo $\hat{x} = \sin \theta \cos \varphi \hat{r} + \cos \theta \cos \varphi \hat{\theta} - \sin \varphi \hat{\phi}$, y posteriormente usar los operadores diferenciales en términos de coordenadas esféricas para operar. Dicho procedimiento se puede consultar en el apéndice Una vez obtenido el resultado de (B.21), se sustituye en la expresión de (B.20) y se procede a operar de manera análoga. De esta manera, el resultado en (B.18) se puede escribir en la forma:

$$\vec{G}_k^{(c)}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{ik}{4\pi} \sum_n \sum_{m=0}^n \alpha_{e_{mn}}^{(c)}(k) \vec{M}_{e_{mn}}(k) + \beta_{e_{mn}}^{(c)}(k) \vec{N}_{e_{mn}}(k), \quad (\text{B.23})$$

donde se han definido las funciones:

$$\begin{aligned}\vec{M}_{\mathbf{e}_{mn}}(k) &= \nabla \times \left(\psi_{\mathbf{e}_{mn}}(k) \vec{r} \right) \\ &= j_n(kr) \left[\mp \frac{m}{\sin \theta} P_n^m(\sin \theta) \frac{\cos(m\varphi)}{\cos(m\varphi)} \hat{\theta} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial P_n^m(\cos \theta)}{\partial \theta} \frac{\cos(m\varphi)}{\sin(m\varphi)} \hat{\varphi} \right]\end{aligned}\quad (\text{B.24})$$

$$\begin{aligned}\vec{N}_{\mathbf{e}_{mn}}(k) &= \frac{1}{k} \nabla \times \nabla \times \left(\psi_{\mathbf{e}_{mn}}(k) \vec{r} \right) \\ &= \frac{n(n+1)}{kr} j_n(kr) P_n^m(\cos \theta) \frac{\cos(m\varphi)}{\sin(m\varphi)} \hat{r} \\ &\quad + \frac{1}{kr} \frac{\partial}{\partial r} [r j_n(kr)] \left\{ \frac{\partial P_n^m(\cos \theta)}{\partial \theta} \frac{\cos(m\varphi)}{\sin(m\varphi)} \hat{\theta} \right. \\ &\quad \left. \mp \frac{m}{\sin \theta} P_n^m(\cos \theta) \frac{\sin(m\varphi)}{\cos(m\varphi)} \hat{\varphi} \right\}.\end{aligned}\quad (\text{B.25})$$

Los coeficiente $\alpha_{\mathbf{e}_{mn}}^{(c)}(k)$ y $\beta_{\mathbf{e}_{mn}}^{(c)}(k)$ definidos en la expresión (B.23) están expresado en términos de $A_{\mathbf{e}_{mn}}^{(c)}(k)$ de diferentes órdenes. Por ejemplo

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{e}_{mn}}^{(x)}(k) &= \frac{-1}{2n(n+1)} [(1 + \delta_1) A_{o(m-1)n} + (n+m+1)(n-m) A_{o(m+1)n}] \\ \beta_{\mathbf{e}_{mn}}^{(x)}(k) &= \frac{1}{2n(n+1)} [(1 + \delta_1) A_{e(m-1)(n-1)} - (n-m-1)(n-m) A_{e(m+1)(n-1)}],\end{aligned}$$

donde

$$\delta_1 = \begin{cases} 1, & m = 1 \\ 0, & m \neq 1 \end{cases}.$$

Ahora bien, para calcular la función de Green diádica se sustituye la función de Green vectorial, obtenida en (B.23), dentro de la expresión (B.15), donde, después de operar algebraicamente, se obtienen las siguientes identidades:

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{e}_{mn}}^{(x)}(k) \hat{x} + \alpha_{\mathbf{e}_{mn}}^{(y)}(k) \hat{y} + \alpha_{\mathbf{e}_{mn}}^{(z)}(k) \hat{z} &= C_{mn} \vec{M}_{\mathbf{e}_{mn}}^{\prime(1)}(k) \\ \beta_{\mathbf{e}_{mn}}^{(x)}(k) \hat{x} + \beta_{\mathbf{e}_{mn}}^{(y)}(k) \hat{y} + \beta_{\mathbf{e}_{mn}}^{(z)}(k) \hat{z} &= C_{mn} \vec{N}_{\mathbf{e}_{mn}}^{\prime(1)}(k),\end{aligned}$$

donde la prima hace referencia a que la función está definida con respecto a (r', θ', φ') , es decir, las coordenadas de la posición \vec{r}' , el superíndice (1) en la notación $\vec{N}_{\mathbf{e}_{mn}}^{\prime(1)}(k)$ significa que la función esta definida con respecto a las funciones esféricas de Hankel de primer tipo, es decir:

$$\vec{N}_{\mathbf{e}_{mn}}^{\prime(1)}(k) = \frac{1}{k} \nabla \times \nabla \left[h_n^{(1)}(kr) P_n^m(\cos \theta) \frac{\cos(m\varphi)}{\sin(m\varphi)} \hat{r} \right],$$

B. ANÁLISIS DIÁDICO

similarmente para $\vec{M}_{\text{e}^{mn}}^{\vec{r}'(1)}(k)$, y los coeficientes C_{mn} están dados por:

$$C_{mn} = (2 - \delta_0) \frac{2n + 1}{n(n + 1)} \frac{(n - m)!}{(n + m)!} \quad (\text{B.26})$$

Por lo tanto, con base en el procedimiento anterior, para el caso en que $\vec{r} < \vec{r}'$ se tiene:

$$\overleftrightarrow{G}_k(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{ik}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n C_{mn} \left[\vec{M}(k) \vec{M}'^{(1)}(k) + \vec{N}(k) \vec{N}'^{(1)}(k) \right].$$

que es lo mismo que la parte de (3.34) sin el término singular derivado por el método de Ohm-Rayleigh. En retrospectiva, la deducción en de la función de Green en la sección 3.2.2.2 muestra la elegancia del método de Ohm-Rayleigh que pasa por alto todas las complicadas manipulaciones involucradas en el método algebraico. El término singular, por supuesto, no se puede derivar del método algebraico basado en $\overleftrightarrow{G}_{e;k}$, pero se puede encontrar comenzando con $\overleftrightarrow{G}_{m;k}$.

Análisis de dispersión de luz

C.1. Imagen de espectro angular

Para simplificar este tipo de problemas se puede hacer uso de la imagen de espectro angular (Angular Spectrum Picture) en el cual se propone expresar la respuesta de una distribución de fuentes en términos de ondas planas y evanescentes, como se expone en la referencia [22]. Para comenzar suponemos que sabemos el campo eléctrico total, en cualquier punto del espacio \vec{r} , del problema de esparcimiento dado por, es decir el campo $\vec{E}(\vec{r})$ dada por:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_{in}(\vec{r}) + \vec{E}_{sc}(r). \quad (C.1)$$

Bajo esta situación, en la imagen de espectro angular estudiamos la solución del problema en un plano, perpendicular al eje z que cruza por $z = z_0$, por lo que nos concentraremos en calcular el campo perpendicular (\vec{E}^\perp) al eje elegido (observar figura C.1).

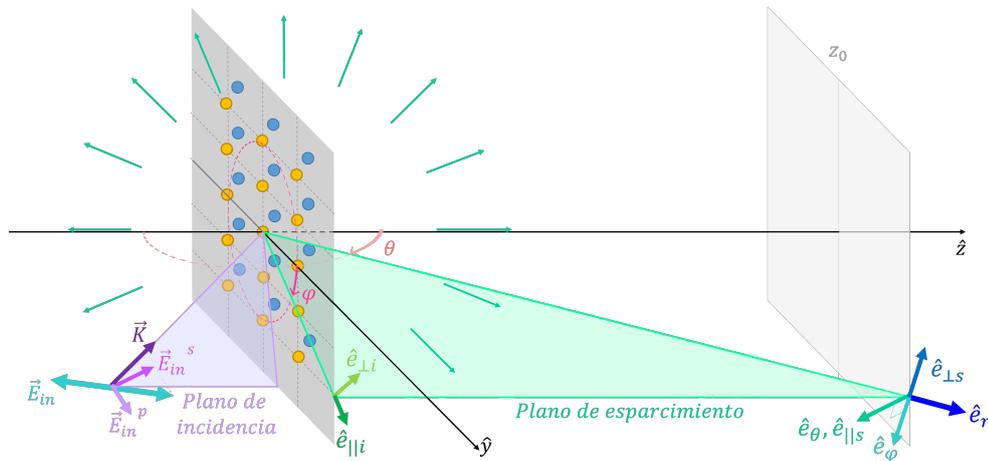


Figura C.1: Esquema del campo dispersado por el cristal donde se muestran los planos de análisis. En esta ilustración también se muestra la definición de los ángulos que definen el plano de esparcimiento.

Para esto, evaluamos la Transformada de Fourier 2-dimensional del campo eléctrico, la cual sabemos que existe[48] ya que suponemos que el campo eléctrico es “suave” lejos de la fuente. De

esta manera se tiene:

$$\begin{aligned}\vec{E}(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)} \iint_{-\infty}^{\infty} \tilde{\vec{E}}(q_x, q_y, z) e^{-i(q_x x + q_y y)} dq_x dq_y, \\ \Rightarrow \tilde{\vec{E}}(q_x, q_y, z) &= \frac{1}{(2\pi)} \iint_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(x, y, z) e^{i(q_x x + q_y y)} dx dy.\end{aligned}$$

Cabe remarcar que al haber asumido que el campo \vec{E} es “suave” podemos pensar que este es bien comportado, en consecuencia, y con el propósito de proceder en el análisis, es factible asumir que en el plano transversal de interés el medio es homogéneo, isotrópico, lineal y sin fuentes. Así, bajo estas condiciones, podemos suponer que el campo eléctrico en el plano corresponde a un campo óptico armónico en el tiempo con un frecuencia angular ω , por lo que, componente a componente, satisface la ecuación de onda de Helmholtz escalar, es decir, se tiene que:

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{E}(\vec{r}) = 0.$$

Introduciendo la Transformada de Fourier en la ecuación de onda se observa que:

$$\begin{aligned}0 = (\nabla^2 + k^2) \vec{E}(\vec{r}) &= \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} (\nabla^2 + k^2) \left[\tilde{\vec{E}}(q_x, q_y, z) e^{-i(q_x x + q_y y)} \right] dq_x dq_y \\ &= \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \left[(k^2 - q_x^2 - q_y^2) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \tilde{\vec{E}}(q_x, q_y, z) \right\} e^{-i\vec{q}_{||} \cdot \vec{r}_{||}} dq_x dq_y.\end{aligned}$$

Por consiguiente, por ortonormalidad de las funciones exponenciales (como en la sección 2.3), se obtiene:

$$\left(k_z^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \tilde{\vec{E}}(q_x, q_y, z) = 0 \quad \text{con } q_z^2 = k^2 - q_x^2 - q_y^2,$$

de donde se concluye que:

$$\tilde{\vec{E}}(q_x, q_y, z) = \tilde{\vec{E}}(q_x, q_y, 0) e^{\pm i q_z z} \quad q_z \equiv \sqrt{k^2 - q_x^2 - q_y^2} \quad \text{con } \text{Im}[k_z] \geq 0. \quad (\text{C.2})$$

Este resultado nos muestra que el espectro de Fourier del campo $\tilde{\vec{E}}$ en un *plano imagen* arbitrario ubicado en $z = cte$ se puede calcular multiplicando el espectro en el *plano del objeto* $z = 0$ por el factor $e^{-i k_z z}$, al cual se le llama *propagador* en el espacio recíproco. En la ecuación (C.2) definimos que la raíz cuadrada que conduce a k_z da un resultado con parte imaginaria positiva. Esto asegura que las soluciones permanezcan finitas para $z \rightarrow \pm\infty$. Más aún, insertando el resultado de la ecuación (C.2) en la transformada de Fourier, finalmente encontramos para z arbitrario se tiene:

$$\boxed{\vec{E}(x, y, z) = \iint_{-\infty}^{\infty} \tilde{\vec{E}}(q_x, q_y, 0) e^{i(q_x x + q_y y \pm q_z z)} dq_x dq_y}, \quad (\text{C.3})$$

que es conocido con el nombre de **representación del espectro angular**.

C.2. Medición experimental

Con el propósito de ejemplificar y asentar el panorama experimental con base en el cual se abordó toda la teoría y el formalismo físico-matemático en el presente proyecto, en esta sección

se reporta una extracción de la referencia [17] en donde se explica un sistema experimental existente en el Laboratorio de Nanofotónica Avanzada del Instituto de Física de la UNAM, el cual sirve para medir transmittancia de muestras nanofotónicas, tales como cristales plasmónicos. Cabe remarcar que las mediciones experimentales que se reportan en dicha referencias corresponden al tipo de mediciones las cuales se busca reproducir por los métodos numéricos y semianalíticos reportados en este trabajo.

Para realizar las mediciones experimentales reportadas en la referencia [17] se usó un sistema rotacional no comercial que permite cambiar el ángulo de incidencia de la luz sobre la muestra, de manera motorizada y automatizada con alta precisión. En la Figura C.2 se ilustra un esquema del sistema.

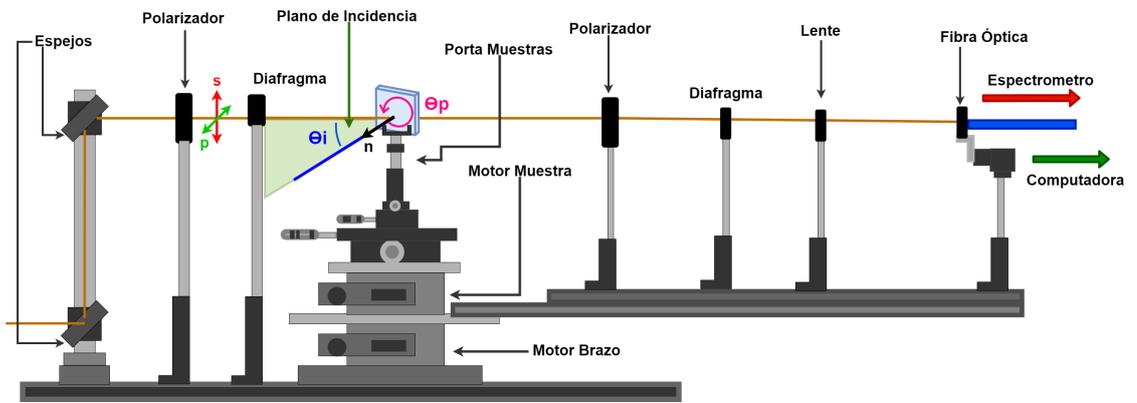


Figura C.2: Esquema del sistema de medición

Como se muestra en la Figura C.2, el sistema cuenta con dos motores que se operan por medio de una computadora. El motor del brazo define la posición del detector en el plano de incidencia, mientras que el motor de la muestra permite rotar la muestra a un ángulo poloidal (θ_i) con respecto al vector de onda incidente. También se puede rotar manualmente la muestra de forma tal que, al mantenerse el vector normal a su superficie, el plano de incidencia escanee diferentes trayectorias del cristal plasmónico. De acuerdo a la Figura C.2, esto implica un cambio en el ángulo azimutal (θ_p).

Para asegurar una alineación inicial de la muestra que corresponda al escaneo a lo largo de la trayectoria de alta simetría ($\Gamma - K$, $\Gamma - M$), se mira al patrón de difracción que produce la nanoestructura al interactuar con un láser (Observar fotografía de la Figura C.3). Por lo tanto, de acuerdo con el patrón de difracción se observa que las dos trayectorias de alta simetría, antes mencionadas, corresponden a las mediciones a ángulos $\theta_p = 0 \text{ rad}$, $\pi/2 \text{ rad}$, respectivamente.

En la práctica experimental, para cuantificar la respuesta óptica de un sistema Nanafotónico, se suele medir los mapas de luz extinguida por la muestra. Para esto se fija el detector a lo largo del eje óptico definido por el vector de onda incidente. Se mide la intensidad transmitida por la muestra T y se normaliza con respecto a la intensidad transmitida en ausencia de la muestra, T_0 . Se obtiene así una cantidad normalizada a 1. La transmisión depende de la longitud de onda incidente (λ_{inc}), del ángulo de incidencia (θ_i) y del ángulo poloidal (θ_p). De esta manera, con base en lo anterior, se define la **Extinción** por medio de:



Figura C.3: Fotografía y esquema de la muestra caracterizada en la referencia [17]. Los cuadros que se observan corresponden a cada uno de los arreglos triangulares. En el centro de cada cuadrado se especifica el parámetro de red del arreglo correspondiente.

$$Extinción(\lambda_{inc}, \theta_i; \theta_p) = 1 - \frac{T(\lambda_{inc}, \theta_i; \theta_p)}{T_0(\lambda_{inc})}, \quad (C.4)$$

Por último, con el objetivo de añadir al estudio de la extinción la dependencia con respecto a la longitud de onda, las mediciones se realizan incidiendo luz blanca, las cual comúnmente poseen un espectro continuo de 400 nm a 900 nm. Asimismo, los polarizadores en Figura C.2, seleccionan únicamente polarización perpendicular (s) o paralela (p) al plano de incidencia, tanto para la luz incidente como para la luz transmitida.

Bibliografía

- [1] T. Ozawa, H. M. Price, A. Amo, N. Goldman, M. Hafezi, L. Lu, M. C. Rechtsman, D. Schuster, J. Simon, O. Zilberberg, and I. Carusotto, “Topological photonics,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 91, p. 015006, Mar 2019. [1](#)
- [2] D. L. Sounas and A. Alù, “Non-reciprocal photonics based on time modulation,” *Nature Photonics*, vol. 11, pp. 774–783, Dec 2017. [1](#)
- [3] M. Kremer, T. Biesenthal, L. J. Maczewsky, M. Heinrich, R. Thomale, and A. Szameit, “Demonstration of a two-dimensional pt-symmetric crystal,” *Nature Communications*, vol. 10, p. 435, Jan 2019. [1](#)
- [4] Z. Wang, Y. D. Chong, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, “Reflection-free one-way edge modes in a gyromagnetic photonic crystal,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 013905, Jan 2008. [1](#)
- [5] N. Shitrit, I. Yulevich, E. Maguid, D. Ozeri, D. Veksler, V. Kleiner, and E. Hasman, “Spin-optical metamaterial route to spin-controlled photonics,” *Science*, vol. 340, no. 6133, pp. 724–726, 2013. [1](#)
- [6] M. Hafezi, S. Mittal, J. Fan, A. Migdall, and J. M. Taylor, “Imaging topological edge states in silicon photonics,” *Nature Photonics*, vol. 7, pp. 1001–1005, Dec 2013. [1](#)
- [7] D. Wang, A. Yang, W. Wang, Y. Hua, R. D. Schaller, G. C. Schatz, and T. W. Odom, “Band-edge engineering for controlled multi-modal nanolasing in plasmonic superlattices,” *Nature Nanotechnology*, vol. 12, pp. 889–894, Sep 2017. [1](#)
- [8] M. Ramezani, A. Halpin, A. I. Fernández-Domínguez, J. Feist, S. R.-K. Rodriguez, F. J. Garcia-Vidal, and J. G. Rivas, “Plasmon-exciton-polariton lasing,” *Optica*, vol. 4, pp. 31–37, Jan 2017. [1](#)
- [9] A. I. Väkeväinen, R. J. Moerland, H. T. Rekola, A.-P. Eskelinen, J.-P. Martikainen, D.-H. Kim, and P. Törmä, “Plasmonic surface lattice resonances at the strong coupling regime,” *Nano Letters*, vol. 14, pp. 1721–1727, Apr 2014. [1](#)
- [10] S. R. K. Rodriguez, J. Feist, M. A. Verschuuren, F. J. Garcia Vidal, and J. Gómez Rivas, “Thermalization and cooling of plasmon-exciton polaritons: Towards quantum condensation,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, p. 166802, Oct 2013. [1](#)
- [11] S. Baur, S. Sanders, and A. Manjavacas, “Hybridization of lattice resonances,” *ACS Nano*, vol. 12, pp. 1618–1629, Feb 2018. [1](#), [111](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [12] C. L. Haynes and R. P. Van Duyne, “Nanosphere lithography: a versatile nanofabrication tool for studies of size-dependent nanoparticle optics,” *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 105, pp. 5599–5611, Jun 2001. [2](#)
- [13] T. Cesca, N. Michieli, B. Kalinic, A. Sánchez-Espinoza, M. Rattin, V. Russo, V. Mattarello, C. Scian, P. Mazzoldi, and G. Mattei, “Nonlinear absorption tuning by composition control in bimetallic plasmonic nanoprism arrays,” *Nanoscale*, vol. 7, pp. 12411–12418, 2015. [2](#)
- [14] N. Michieli, R. Pilot, V. Russo, C. Scian, F. Todescato, R. Signorini, S. Agnoli, T. Cesca, R. Bozio, and G. Mattei, “Oxidation effects on the sers response of silver nanoprism arrays,” *RSC Adv.*, vol. 7, pp. 369–378, 2017. [2](#)
- [15] V. Russo, N. Michieli, T. Cesca, C. Scian, D. Silvestri, M. Morpurgo, and G. Mattei, “Gold–silver alloy semi-nanoshell arrays for label-free plasmonic biosensors,” *Nanoscale*, vol. 9, pp. 10117–10125, 2017. [2](#)
- [16] N. Michieli, B. Kalinic, C. Scian, T. Cesca, and G. Mattei, “Emission rate modification and quantum efficiency enhancement of er³⁺ emitters by near-field coupling with nanohole arrays,” *ACS Photonics*, vol. 5, pp. 2189–2199, Jun 2018. [2](#)
- [17] E. M. Sandoval, “Estudio teórico-experimental de la respuesta óptica de arreglos de nanopartículas metálicas ordenadas,” 2019. [2](#), [88](#), [137](#), [138](#)
- [18] Chen-To-Tai, *Dyadic Green Function in Electromagnetic Theory*. IEEE PRESS, 1993. [3](#), [4](#), [52](#)
- [19] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*. Cambridge University Press, 2017. [9](#)
- [20] W. B. Arfken & J, *Mathematical Methods for Physicists*. Elsevier, 2005. [12](#), [19](#), [27](#)
- [21] R. Churchill, *Complex variables and Application*. Mc Graw Hill. [17](#), [76](#)
- [22] L. Nototny, *Principles of Nano-optics*. Cambridge University Press, 2006. [43](#), [74](#), [123](#), [135](#)
- [23] H. B. Guerrero, “Método de elemento finito aplicado a nanoestructuras plasmónicas,” 2017. [44](#), [45](#)
- [24] P. Dechaumphai, *Finite element method: fundamentals and applications*. Alpha Science International, 2010. [44](#)
- [25] P. Debye, “Der lichtdruck auf kugeln von beliebigem material,” *Annalen der Physik*, vol. 335, no. 11, pp. 57–136, 1909. [49](#)
- [26] C. Bouwkamp and H. Casimir, “On multipole expansions in the theory of electromagnetic radiation,” *Physica*, vol. 20, no. 1, pp. 539–554, 1954. [49](#)
- [27] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. Wiley, 1999. [51](#)
- [28] A. Somerfeld, *Partial Differential Equation*. Academic Press, 1949. [53](#)
- [29] G. Mie, “Beiträge zur optik trüber medien, speziell killoidaler metallosungen,” *Ann. der Phys.*, vol. 25, pp. 377–445, 1908. [56](#)
- [30] J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*. IEEE PRESS, 1941. [56](#)

-
- [31] C. F. B. y D. R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles*. Jhon Wiley Sons, 1983. 58
- [32] A. Vaskin, R. Kolkowski, A. F. Koenderink, and I. Staude, “Light-emitting metasurfaces,” *Nanophotonics*, vol. 8, no. 7, pp. 1151–1198, 2019. 60
- [33] G. W. Mulholland, C. F. Bohren, and K. A. Fuller, “Light scattering by agglomerates: Coupled electric and magnetic dipole method,” *Langmuir*, vol. 10, pp. 2533–2546, Aug 1994. 61
- [34] a. V. M. Kreibig, U., *Optical properties of metal clusters*. Springer Series in Materials Science., 1995. 61, 62
- [35] H. Eckardt, L. Fritsche, and J. Noffke, “Self-consistent relativistic band structure of the noble metals,” *Journal of Physics F: Metal Physics*, vol. 14, pp. 97–112, jan 1984. 62
- [36] E. A. Coronado and G. C. Schatz, “Surface plasmon broadening for arbitrary shape nanoparticles: A geometrical probability approach,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 119, no. 7, pp. 3926–3934, 2003. 63, 64
- [37] P. B. Johnson and R. W. Christy, “Optical constants of the noble metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 6, pp. 4370–4379, Dec 1972. 63, 97, 106
- [38] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Harcourt College Publishers, 1976. 70
- [39] E. Born, M. & Wolf, *Principles of Optics*. Cambridge University Press, 1999. 72
- [40] P. P. Ewald, “Die berechnung optischer und elektrostatischer gitterpotentiale,” *Annalen der Physik*, vol. 369, no. 3, pp. 253–287, 1921. 76, 81
- [41] M. L. Glaser and I. J. Zucker, *Theoretical Chemistry: Advances and Perspectives*. Academic, New York, 1980. 76, 81
- [42] C. M. Linton, “Lattice sums for the helmholtz equation,” *SIAM Review*, vol. 52, no. 4, pp. 630–674, 2010. 77, 81, 83
- [43] E. Bott, M. Methfessel, W. Krabs, and P. C. Schmidt, “Nonsingular hankel functions as a new basis for electronic structure calculations,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 39, no. 6, pp. 3393–3425, 1998. 78
- [44] E. V. Kholopov, “A simple general proof of the krazer–prym theorem and related famous formulae resolving convergence properties of coulomb series in crystals,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 40, pp. 6101–6117, may 2007. 81, 82
- [45] *Handbook of Mathematical Functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. DOVER PUBLICATIONS, 1964. 83
- [46] F. J. G. de Abajo, J. J. Sáenz, I. Campillo, and J. S. Dolado, “Site and lattice resonances in metallic hole arrays,” *Opt. Express*, vol. 14, pp. 7–18, Jan 2006. 91
- [47] COMSOL, “Wave optics module user’s guide.” Manual. 107
- [48] O. Dzagnidze, “One-dimensional fourier series of a function of many variables,” *Transactions of A. Razmadze Mathematical Institute*, vol. 171, no. 2, pp. 167–170, 2017. 135
-