

Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE CIENCIAS

RESPUESTA ÓPTICA DE METASUPERFICIES DESORDENADAS COMPUESTAS POR PARTÍCULAS ESFÉRICAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Física

PRESENTA:

Isabel Yajaira Rojas Martinez

TUTOR

Dr. Alejandro Reyes Coronado

Ciudad Universitaria, CD. MX., 2021



FACULTAD DE CIENCIAS UNAM



Universidad Nacional Autónoma de México



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.

When you consider things like the stars, our affairs don't seem to matter much, do they?

— Virginia Woolf, Night and Day

AGRADECIMIENTOS

Todas las personas a las que he conocido han contribuido de alguna manera a construir la persona que soy, por ello, tengo varias cosas por las cuales estar agradecida. Espero que estas líneas puedan ser suficientes para agradecer a todos aquellos que tienen un lugar especial en mi vida.

Quiero empezar agradeciendo a mi familia, sin la cual no habría sido posible llegar a este punto de mi vida. Estaré eternamente agradecida con mi hermana Mara R. por jamás haberse rendido y mostrarme lo que significan la perseverancia y tenacidad. Gracias a ella los obstáculos que puedan aparecer en mi vida jamás serán lo suficientemente grandes. A mi madre Esperanza M. por acompañarnos en nuestros caminos y darnos la mejor guía posible. A mi hermana Lisseth R. y mi sobrino Pablo R. por todos los momentos que me han regalado.

Al Dr. Alejandro Reyes Coronado, mi asesor, le debo mucho de la física en la que me he convertido y de la que pretendo llegar a ser. Sin su dedicación, tiempo y consejos, no sólo este trabajo habría sido distinto, sino también el rumbo que mi carrera ha seguido. Sin duda, él es uno de los cimientos más importantes de mi formación. De igual forma, eternamente le agradeceré la oportunidad que me dio para trabajar en su grupo de investigación, pues me permitió conocer a personas maravillosas. Especialmente doy las gracias a la Dra. Alma K. González por el tiempo que me ha dedicado, el conocimiento que me comparte y los valiosos comentarios que realizó sobre este trabajo. Al Dr. José A. Castellanos por sus palabras de aliento que llegaron en los momentos más necesarios y por su inmensa disposición para ayudarnos a mejorar. Igualmente, agradezco al Fís. Jonathan A. Urrutia por siempre tomarse la molestia y el tiempo para brindarme sus consejos y guía.

Otro tanto tengo que agradecer a la Act. Valeria M. por ser mi compañera incondicional y la persona más estupenda que conoceré jamás. Eres mucho mejor que cualquier idea que yo pude haber concebido jamás para mi mejor amiga. Agradeceré por siempre a la vida por permitirme cruzarme con Diana C., todos los años que hemos compartido he podido aprender de la maravillosa persona que es. Agradezco al Fís. Sebastián A. por ser un amigo excelente, por todo el apoyo y aliento, pero sobre todos, por todas las risas que hemos compartido. A Ossmar D. por ser mi primer amigo en la universidad (y el mejor que pude encontrar). Gracias por soportarme tanto, la paciencia la he aprendido de ti. Agradezco también a Brandon R. y Jesica G. por ser mis amigos/compañeros en toda la licenciatura. De ustedes he aprendido demasiado. Por último, pero no menos importante, a la Act. Gabriela G. le agradezco por su amistad tan especial.

Agradezco también a la Dra. Martha Rosete, al Dr. Edgar Alvarez, a la Dra. Citlali Sánchez y al Dr. Andrés Botello por el tiempo dedicado a la revisión de este trabajo. Asimismo, agradezco el apoyo económico que se me otorgó durante un año a través de una beca de licenciatura del proyecto DGAPA-UNAM PAPIIT IN114919.

RESUMEN

Al ser iluminadas con luz, las partículas esféricas presentan intensas resonancias multipolares. Las partículas esféricas dieléctricas de alto índice de refracción presentan resonancias tanto magnéticas como eléctricas dentro del rango de frecuencias ópticas y del infrarrojo cercano, mientras que las partículas con respuesta metálica sólo exhiben resonancias de tipo eléctrico. La interferencia entre diferentes resonancias produce efectos tipo Kerker, los cuales permiten minimizar el esparcimiento frontal o suprimir el retroesparcimiento de la partícula. Con el propósito de determinar los parámetros para los cuales se logran efectos tipo Kerker en partículas esféricas individuales, con respuesta metálica (oro y bismuto) o dieléctrica (silicio y carburo de silicio), se analiza la respuesta óptica usando teoría de Mie. A partir del análisis de partículas individuales, se estudian las propiedades ópticas de metasuperficies desordenadas, mostrando que es posible suprimir la reflectividad dentro de un amplio rango de longitudes de onda y ángulos de incidencia. También se muestra la existencia de ángulos de seudo-Brewster dentro del rango óptico del espectro electromagnético, para monocapas tanto de partículas con respuesta metálica como dieléctricas, para ambas polarizaciones. El estudio de las propiedades ópticas de arreglos desordenados de partículas esféricas idénticas se realiza analizando de forma teórica la reflectividad y transmitancia coherentes, calculadas con el modelo de esparcimiento coherente, en función del radio de la partícula, fracción de cubierta, longitud de onda y estado de polarización de la luz incidente.

ÍNDICE GENERAL

Ag	Agradecimientos							
Re	Resumen							
In	Introducción							
1.	Teo	ría			5			
	1.	Reflex	ión y trans	smisión de una onda electromagnética por una interfaz plana	5			
		1.1.	Ecuacion	nes de Maxwell	5			
		1.2.	Fórmula	s de Fresnel	7			
			1.2.1.	Ángulo de Brewster	12			
	2.	Espare	cimiento p	or una partícula esférica aislada	14			
		2.1.	Soluciór	1 de Mie	16			
			2.1.1.	Secciones transversales de esparcimiento, extinción y absorción	20			
		2.2.	Respues metálica	ta óptica de partículas esféricas individuales dieléctricas y con respuesta	25			
	3.	Efecto	s tipo Ker	ker	28			
		3.1.	Efecto B	srewster generalizado	35			
	4.	Model	odelo de esparcimiento coherente		38			
		4.1.	Monocapa desordenada suspendida en el espacio libre					
		4.2.	Monoca	pa desordenada soportada sobre un sustrato	42			
2.	Res	ultados			47			
	1.	Respuesta óptica de partícula aislada		a de partícula aislada	47			
		1.1. Partículas dieléctricas de alto índice de refracción		as dieléctricas de alto índice de refracción	47			
			1.1.1.	Silicio	47			
			1.1.2.	Carburo de silicio	53			
		1.2.	2. Partículas con respuesta metálica					
			1.2.1.	Oro	58			
			1.2.2.	Bismuto	62			

	2. Reflectividad y transmitancia en metasuperficies desordenadas .			transmitancia en metasuperficies desordenadas		67		
		2.1.	Monoca	apa desordenada suspendida en el espacio libre		68		
			2.1.1.	Monocapa desordenada de partículas de silicio		68		
			2.1.2.	Monocapa desordenada de partículas de carburo de silicio		71		
			2.1.3.	Monocapa desordenada de partículas de oro		74		
			2.1.4.	Monocapa desordenada de partículas de bismuto		77		
		2.2.	Monoca	apa desordenada soportada sobre un sustrato		80		
			2.2.1.	Monocapa desordenada soportada de partículas de silicio		80		
			2.2.2.	Monocapa desordenada de partículas de carburo de silicio		83		
			2.2.3.	Monocapa desordenada soportada de partículas de oro		87		
			2.2.4.	Monocapa desordenada soportada de partículas de bismuto		90		
3.	Apli	asuperficies desordenadas		95				
	1.	e ángulos de seudo-Brewster		95				
	1.1. Metasuperficie de partículas de silicio					95		
	1.2. Metasuperficie de partículas de carburo de silicio							
	1.3. Metasuperficie de partículas de oro					97		
		1.4.	Metasu	perficie de partículas de bismuto		99		
	2.	Metas	superficies	aleatorias antireflejantes		102		
Conclusiones 1								
Apéndice A. Efectos tipo Kerker en diferentes matrices 1								
Aŗ	oéndio	ce B. Á	Ángulo de	incidencia máximo		115		
Bibliografía								

INTRODUCCIÓN

La interacción de luz con estructuras sublongitud de onda es un campo de interés debido a sus diversas aplicaciones [1-5]. En particular, las nanoestructuras metálicas han sido ampliamente utilizadas debido a que es posible manipular y controlar la radiación óptica en la escala nanométrica [6], siendo el oro y la plata los materiales más usados. Los materiales que presentan un comportamiento metálico soportan plasmones localizados de superficie (LSP, por sus siglas en inglés), que son oscilaciones colectivas de los electrones libres en las nanopartículas [7]. Las nanopartículas plasmónicas han encontrado aplicaciones en biosensores [8, 9], celdas solares [10, 11], dispositivos fototérmicos [12-14], y han permitido observar efectos no lineales [15], entre otros. Sin embargo, las aplicaciones tecnológicas de las nanopartículas plasmónicas están limitadas debido a que presentan grandes pérdidas por disipación. Recientemente, se ha propuesto el uso de estructuras dieléctricas de alto índice de refracción como una alternativa al uso de nanopartículas plasmónicas, puesto que permiten evitar las pérdidas por disipación, permitiendo así el surgimiento de una nueva rama en la nanofotónica [16]. En las partículas dieléctricas es posible excitar resonancias tipo Mie tanto magnéticas como eléctricas dentro del rango óptico del espectro electromagnético, lo cual es de utilidad para potenciales aplicaciones tecnológicas.

En el 2011, se predijo teóricamente la presencia de resonancias dipolares magnéticas intensas en partículas esféricas submicrométricas de silicio, dentro el rango visible e infrarrojo cercano [17], y en 2012 Kuznetsov *et al.* [18] las observaron experimentalmente. En la Fig. 1(a) se muestran imágenes obtenidas con microscopio de campo obscuro (izquierda) y microscopio electrónico de barrido (derecha) de las nanopartículas de silicio de distintos tamaños producidas por ablación láser. En la Fig. 1(b) se muestran las seis partículas indicadas en la Fig. 1(a), siendo la número 1 la más pequeña (diámetro 100 nm), cuyo color azul se debe a la resonancia dipolar magnética. En la partícula número 6 (diámetro 270 nm) se inducen resonancias de los dipolos eléctrico y magnético, junto a la resonancia del cuadrupolo eléctrico. Puesto que las resonancias aparecen a diferentes longitudes de onda, la luz esparcida por la partícula es una combinación de distintos colores, y es posible generar luz blanca.

El uso de partículas, tanto metálicas como dieléctricas, ha permitido el desarrollo de *metamateriales*, los cuales se refieren a materiales artificiales diseñados con el propósito de obtener características que no se encuentran comúnmente en la naturaleza [19, 20]. En particular, las *metasuperficies* son materiales 2D compuestos por estructuras sublongitud de onda (*meta-átomos*), que permiten variaciones de la respuesta óptica (por ejemplo de fase y de polarización) [21], la generación de frentes de onda con formas específicas [22] y la observación de respuestas ópticas no lineales intensas [23], encontrado diversas aplicaciones. Como ejemplo de la aplicación de metasuperficies está la creación de colores estructurales [24-26], los cuales se refieren a colores producidos por la interferencia de luz esparcida por nano o microestructuras. Es interesante resaltar que los colores estructurales no son exclusivos de materiales artificiales, pues se pueden observar en la naturaleza, por ejemplo en las alas de algunas mariposas [Fig. 1(c)], en el plumaje de la cola de un pavo real macho [Fig. 1(d)], en escarabajos [Fig. 1(e)] [27], entre otros. Las metasuperficies dieléctricas también han sido propuestas como un método de separación de enantiómeros [28, 29].

La presencia de diferentes resonancias multipolares inducidas en una nanopartícula da lugar a efectos de interferencia. En particular, son de interés los efectos tipo Kerker, los cuales se refieren a la minimización



Fig. 1: (a) Microscopía de campo obscuro (izquierda) y de SEM (derecha) de partículas de silicio obtenidas por medio de ablación láser. Se numeran seis nanopartículas de distintos tamaños, cuya luz esparcida se muestra en (b). Fotografías de (c) la mariposa azul *Morpho rhetenor*, (d) pluma de la cola de un pavo real macho y del (e) escarabajo *Entimus imperialis*. Las imágenes en (a, b) se adaptaron de la referencia [18], mientras que las fotografías en (c, d, e) se extrajeron de la referencia [27].

del esparcimiento de una partícula en alguna dirección particular [30]. En 1983, M. Kerker *et al.* [31] propusieron las condiciones bajo las cuales el esparcimiento frontal de una partícula esférica con respuesta eléctrica y magnética puede ser minimizado, o bien el retroesparcimiento suprimido completamente. El efecto tipo Kerker se ha observado en partículas dieléctricas que no presentan una respuesta magnética intrínseca, pero en las cuales se puede inducir la respuesta del dipolo magnético dentro del rango óptico [32, 33]. Las condiciones de Kerker originales establecen que, para eliminar el retroesparcimiento frontal se requiere que los dipolos magnético y eléctrico inducidos tengan la misma magnitud y oscilen en fase (*primera condición de Kerker*), mientras que para minimizar el esparcimiento frontal se requiere que los dipolos oscilen con una diferencia de fase igual a π (*segunda condición de Kerker*). La propuesta original de Kerker *et al.* se ha extendido al considerar que un efecto similar puede ser obtenido en partículas de forma arbitraria, cúmulos de partículas y a través de la interferencia de multipolos de orden mayor al dipolar. Éstos son conocidos como *efectos generalizados de Kerker* [34] y han sido empleados, por ejemplo, para generar metasuperficies con transmisión y absorción perfecta [35], y metasuperficies con reflexión cercana a cero [36, 37].

Particularmente, los efectos generalizados de Kerker han permitido explorar el efecto Brewster generalizado en metasuperficies dieléctricas. En 2016 se observó la presencia de ángulos de seudo-Brewster, para ambas polarizaciones y dentro del rango óptico, usando una metasuperficie ordenada compuesta de partículas esféricas de silicio [Fig. 2(a)] [38]. En las Figs. 2(b, c) se muestran los mapas de reflectividad en función de la longitud de onda incidente y el ángulo de incidencia, para polarización p y s, respectivamente. Las líneas blancas punteadas señalan regiones donde la reflectividad se aproxima a cero. Junto a los mapas de reflectividad de las Figs. 2(b, c) se muestran cortes a $\lambda = 540$ nm y $\lambda = 710$ nm, respectivamente. Las líneas azules continuas muestran ángulos de seudo-Brewster para cada una de las polarizaciones. El estudio se realizó no sólo de forma teórica, sino también experimental; para las mediciones de reflectividad se utilizó una metasuperficies ordenada de nanodiscos de silicio [Fig. 2(d)], con las dimensiones apropiadas para asemejar la respuesta óptica de la metasuperficie de esferas. Los espectros de reflectividad medidos para longitudes de onda entre $\lambda = 590$ nm y $\lambda = 775$ nm se muestran en la Fig. 2(e), donde la línea roja corresponde a polarización p y la azul a polarización s. Para polarización p se observó la aparición del ángulo de seudo-Brewster que, según la longitud de onda, aparecen alrededor de ángulos de incidencia entre 25° y 70°, aproximadamente. Para la polarización s se observaron mínimos de reflectividad a $\lambda = 735$, 755 y 775 nm. Paniagua *et al.* [38] propusieron que la aparición de ángulos de seudo-Brewster requiere sólo de la interferencia de los dipolos eléctrico y magnético inducidos en cada partícula, que da lugar a la minimización del esparcimiento en la dirección de la luz reflejada por la metasuperficie. En 2020, P. Wray y H. Atwater [39] estudiaron la respuesta óptica de monocapas desordenadas de partículas esféricas dieléctricas, particularmente de silicio. Se comprobó teóricamente que las propiedades ópticas de una partícula individual se conservan en la respuesta óptica de la monocapa. Sin embargo, a pesar de haber identificado efectos tipo Kerker en la partícula de silicio individual, no se observaron ángulos de seudo-Brewster en el espectro de reflectividad de la monocapa, al considerar la longitud de onda incidente para la cual se minimiza el retroesparcimiento de la partícula individual [39].



Fig. 2: (a) Esquema de una monocapa ordenada compuesta de partículas esféricas de silicio suspendida en el espacio libre. Los cálculos de reflectividad para polarización (b) p y (c) s se muestran en función de la longitud de onda incidente y del ángulo de incidencia. En los cortes para $\lambda = 540$ nm y $\lambda = 710$ nm las líneas continuas corresponden a la polarización p y s, respectivamente. (d) Imágenes de la metasuperficie de nanodiscos ordenados de silicio obtenida con microscopio electrónico de barrido. (e) Espectros de reflectividad medidos (puntos) y obtenidos de simulación (líneas continuas) de la metasuperficie de nanodiscos para polarización p (rojo) y polarización s (azul). Las imágenes se adaptaron de la referencia [38].

Continuando con la línea de pensamiento propuesta por Paniagua *et al.*, el efecto de seudo-Brewster requiere sólo de minimizar el retroesparcimiento de la partícula individual. Una manera de lograrlo es el uso de partículas esféricas con respuesta metálica, las cuales permiten excitar resonancias de tipo eléctrico de orden mayor al dipolar, y así lograr efectos generalizados de Kerker. En particular, el bismuto es un semimetal en el que se han observado resonancias plasmónicas sintonizables desde el ultravioleta cercano al infrarrojo cercano [40, 41], por lo que ha sido utilizado en diversas aplicaciones [42-45]. Por otro lado, México es uno de los principales productores de bismuto [46], así que resulta interesante explorar su potencial.

El objetivo de esta tesis de licenciatura es caracterizar la respuesta óptica (reflectividad y transmitancia) de una metasuperficie compuesta por una monocapa desordenada de partículas esféricas idénticas, así como determinar si la respuesta óptica de la partícula individual se preserva en la respuesta de la metasuperficie. Se exploran tanto materiales dieléctricos (silicio y carburo de silicio), como de respuesta metálica (oro y bismuto). El análisis parte del estudio de la respuesta óptica de una partícula individual a través de la solución de Mie [1]. Para cada uno de los materiales (silicio, carburo de silicio, oro y bismuto) se determina un tamaño de partícula óptimo para el que la respuesta óptica está dominada por el dipolo y cuadrupolo eléctricos en las partículas con respuesta metálica, o por los dipolos eléctrico y magnético en las partículas dieléctricas. Para cada material se obtuvo la longitud de onda para la cual se presenta el efecto Kerker. A través del modelo de esparcimiento coherente [47], se calcula la reflectividad y transmitancia coherentes para la monocapa de partículas esféricas suspendida en el espacio libre, considerando fracciones de cubierta menores o iguales al 20 %. También se considera el efecto de un sustrato dieléctrico (vidrio y silicio), y se estudia la posibilidad de observar ángulos de seudo-Brewster en monocapas de partículas con respuesta metálica o dieléctrica. Por último, se revisa en detalle las propiedades antireflejantes de las metasuperficies aleatorias compuestas por partículas con respuesta metálica (oro y bismuto).

Teoría

A lo largo de este capítulo se describirá la interacción de la luz con la materia en dos situaciones distintas. Primero, se discutirá lo que sucede con una onda electromagnética plana que incide sobre una interfaz plana que separa a dos medios, ambos lineales, homogéneos e isótropos. Para ello, se partirá de las ecuaciones de Maxwell con el fin de describir las condiciones que imponen sobre los campos electromagnéticos al cruzar una interfaz arbitraria, y se concluirá con las fórmulas de Fresnel. En la segunda sección se tratará al esparcimiento de luz por una partícula esférica aislada con tamaño arbitrario, por medio de la solución de Mie¹, obteniendo expresiones para los campos electromagnéticos esparcidos por la partícula. En la tercera sección se hará una breve distinción entre el tipo de respuesta inducida en partículas esféricas compuestas por materiales dieléctricos y con respuesta metálica. Las diferentes respuestas inducidas dan lugar a los efectos tipo Kerker, extensión del trabajo original de M. Kerker *et al.* [31], presentados en la cuarta sección. Una consecuencia inmediata de estos efectos es la potencial aparición de un ángulo tipo Brewster, tanto para polarización *p* como *s*, en monocapas desordenadas compuestas de partículas esféricas. Por último, se describe el modelo de esparcimiento coherente, con el que se calculan los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes para una monocapa desordena de partículas esféricas inmersas en un medio (matriz) y soportadas por un sustrato [47, 48].

1 REFLEXIÓN Y TRANSMISIÓN DE UNA ONDA ELECTROMAGNÉTICA POR UNA INTERFAZ PLANA

1.1 Ecuaciones de Maxwell

Los fenómenos electromagnéticos son descritos por las cuatro ecuaciones de Maxwell, junto con la expresión para la fuerza de Lorentz [49]. En unidades del sistema internacional, las ecuaciones de Maxwell son [49]:

$oldsymbol{ abla} \cdot \mathbf{E} = rac{ ho_{tot}}{\epsilon_0},$	Ley de Gauss eléctrica	(1.1)
$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0,$	Ley de Gauss magnética	(1.2)
$\mathbf{\nabla} \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},$	Ley de Faraday–Lenz	(1.3)

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}_{tot} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t},$$
 Ley de Ampère–Maxwell (1.4)

¹La solución de Mie también se conoce popularmente como *teoría de Mie*. Sin embargo, en esta tesis se utilizará el nombre *solución de Mie*.

en donde E corresponde al campo eléctrico, mientras que B denota al campo magnético; ϵ_0 corresponde a la permitividad eléctrica del vacío, mientras que μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío. Por otra parte, ρ_{total} se refiere a la densidad volumétrica de carga total y \mathbf{J}_{tot} a la densidad volumétrica de corriente total. Las ecuaciones de Maxwell pueden ser desacopladas para obtener una ecuación para cada uno de los campos E y B. Considerando que los campos se propagan en un medio sin fuentes externas, es decir, $\mathbf{J}_{tot} = \mathbf{0}$, $\rho_{tot} = 0$, y usando la transformada de Fourier, se obtiene la ecuación de Helmholtz vectorial para los campos E y B [50]

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \qquad \nabla^2 \mathbf{B} + k^2 \mathbf{B} = 0, \tag{1.5}$$

respectivamente. Una solución a la ecuación de Helmholtz son las ondas electromagnéticas (EMs) planas que en notación de Euler se escriben como [50]:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \qquad \mathbf{B} = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \tag{1.6}$$

donde \mathbf{E}_0 y \mathbf{B}_0 son las amplitudes complejas de los campos, ω denota a la frecuencia angular asociada a la onda, y k es el vector de onda. Las Ecs. (1.6) son soluciones a las ecuaciones de Maxwell siempre y cuando cumpla la *relación de dispersión*: $\omega = kc/n$, donde c denota la velocidad de la luz y $n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r}$ corresponde al índice de refracción. Las cantidades ϵ_r y μ_r corresponden a la permitividad eléctrica y permeabilidad magnética relativas del medio de propagación. Se calculan al dividir la permitividad (permeabilidad) del medio por la permitividad (permeabilidad) del vacío, es decir, ϵ/ϵ_0 (μ/μ_0). Por lo cual, las cantidades ϵ_r y μ_r son adimensionales. Por otra parte, algunas de las características de la permitividad eléctrica y de la permeabilidad magnética de un medio son que ambas corresponden a funciones de la frecuencia de la onda incidente y son cantidades complejas [50].

Mientras la onda se propaga dentro del medio transporta energía con ella. La densidad de flujo de energía (energía por unidad de área, por unidad de tiempo) transportada por los campos está dada por el vector de Poynting que, para ondas planas, se define como [50]

$$\mathbf{S} \equiv \frac{1}{\mu_0} \left(\mathbf{E} \times \mathbf{B} \right). \tag{1.7}$$

Es interesante considerar que los vectores \mathbf{E} , \mathbf{B} y \mathbf{k} cumplen con ser ortogonales entre sí cuando se propagan en el vacío, por tanto, las ondas electromagnéticas (EMs) son ondas de tipo transversal [50]. En un medio isótropo (sus propiedades ópticas en cada punto son independientes de la dirección), el vector de Poynting es paralelo a la dirección de propagación del campo, es decir, al vector de onda k [51].

Las ecuaciones de Maxwell representan ecuaciones diferenciales parciales aplicadas localmente en cada punto del espacio; a partir de ellas se determina el comportamiento de los campos EMs cuando cruzan una interfaz arbitraria que separa a dos medios [50], cada uno caracterizado por sus propiedades eléctricas: ϵ_1 , μ_1 para el medio 1 y ϵ_2 , μ_2 para el medio 2 [ver Fig. 1.1]. Se considera que los materiales que componen a cada uno de los medios cumplen con ser lineales, homogéneos (sus propiedades son iguales en cada punto) e isótropos. El cálculo de las condiciones de frontera que satisfacen los campos EMs sobre la interfaz se realiza a partir de la forma integral de las ecuaciones de Maxwell. Para ello, se utiliza el volumen de un prisma rectangular con altura δ , cuyas caras paralelas a la interfaz tienen área A [Fig. 1.1(a)]. La mitad del volumen está inmerso en el medio 1 y la otra mitad dentro del medio 2, por tanto, el volumen contiene a la interfaz entre los medios. Por otro lado, también es necesario usar una trayectoria de ancho l y altura δ [Fig. 1.1(b)]. En el caso donde las fuentes externas son nulas ($\mathbf{K}_{tot} = \mathbf{0}$, $\sigma_{tot} = 0$), las condiciones de frontera son [50]:

$$\epsilon_{1}E_{1}^{\perp} - \epsilon_{2}E_{2}^{\perp} = 0, \qquad \mathbf{E}_{1}^{\parallel} - \mathbf{E}_{2}^{\parallel} = \mathbf{0}, \\ B_{1}^{\perp} - B_{2}^{\perp} = 0, \qquad \frac{1}{\mu_{1}}\mathbf{B}_{1}^{\parallel} - \frac{1}{\mu_{2}}\mathbf{B}_{2}^{\parallel} = \mathbf{0},$$
(1.8)

donde los subíndices 1 y 2 corresponden al medio donde se evalúan los campos. Los superíndices \perp y \parallel indican a las componentes perpendicular y paralela a la superficie de la interfaz, respectivamente.



Fig. 1.1: Diagrama de una interfaz (superficie en verde) que separa dos medios distintos. El medio 1 tiene propiedades ópticas ϵ_1 , μ_1 , mientras que las del medio 2 son ϵ_2 , μ_2 . (a) Prisma rectangular con altura δ y cuyas caras paralelas a la superficie tiene un área A. Sobre la superficie que separa a los medios existe una densidad de carga superficial total igual a σ_{tot} . (b) Circuito rectangular con altura δ y ancho l. En la interfaz entre los medios hay una densidad de corriente superficial \mathbf{K}_{tot} .

1.2 Fórmulas de Fresnel

Cuando una onda plana incide sobre la frontera entre dos medios homogéneos, cada uno con propiedades ópticas distintas, se divide en dos nuevas ondas: la onda transmitida, propagándose en el medio de transmisión, con índice de refracción n_t , y la onda reflejada que se propaga dentro del medio de incidencia, con índice de refracción n_i (ver Fig. 1.2) [52]. Los vectores de onda de las ondas incidente k_i (en verde en la Fig. 1.2), reflejada k_r (en rojo en la Fig. 1.2) y transmitida k_t (en azul en la Fig. 1.2) se encuentran contenidas en el mismo plano que también contiene al vector normal (\hat{e}_n) a la interfaz que separa a los medios. A este plano se le conoce como *plano de incidencia*. Cada uno de los vectores de onda (incidente, reflejado y transmitido) forman un ángulo respecto a la normal; de esta forma, se miden los ángulos de incidencia (θ_i), reflexión (θ_r) y transmisión (θ_t).



Fig. 1.2: Reflexión y transmisión en una interfaz plana. Los vectores de onda correspondientes a las ondas incidente (\mathbf{k}_i , flecha verde), reflejada (\mathbf{k}_r , flecha roja) y transmitida (\mathbf{k}_t , flecha azul) son coplanares, con el vector normal ($\hat{\mathbf{e}}_n$) a la interfaz que separa a los medios con índices de refracción n_i y n_t . El plano donde se encuentran se conoce como *plano de incidencia*. Los ángulos de incidencia θ_i , de reflexión θ_r y de transmisión θ_t se miden a partir de la línea normal a la interfaz. El medio de incidencia tiene índice de refracción n_i , mientras que el medio de transmisión tiene índice de refracción n_t .

Con el fin de analizar el problema de una onda EM plana, monocromática y polarizada linealmente que incide sobre una interfaz plana, se considera que el plano z = 0 corresponde a la interfaz entre el medio de incidencia con índice de refracción n_i y el medio de transmisión, con índice de refracción n_t .

CAPÍTULO 1 • TEORÍA

El campo eléctrico asociado a la onda incidente se escribe como

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)}.$$
(1.9)

Las ondas reflejada y transmitida preservan la forma de una onda plana, por tanto, los campos eléctricos asociados a la onda reflejada y a la transmitida se pueden representar como [51]

$$\mathbf{E}_{r} = \mathbf{E}_{0r} e^{i(\mathbf{k}_{r} \cdot \mathbf{r} - \omega_{r} t)}, \qquad \mathbf{E}_{t} = \mathbf{E}_{0t} e^{i(\mathbf{k}_{t} \cdot \mathbf{r} - \omega_{t} t)}, \tag{1.10}$$

respectivamente. Además, las ondas reflejada y transmitida conservan la frecuencia angular de la onda incidente, es decir, $\omega_i = \omega_r = \omega_t = \omega$ [51]. Las condiciones de frontera mostradas en las Ecs. (1.8) se deben cumplir en todos los puntos del plano que separa a los medios, es decir, la interfaz, para cualquier tiempo t. Por esta razón, los factores dentro de las exponenciales en las Ecs. (1.9) y (1.10) se igualan [51]:

$$\left(\mathbf{k}_{i}\cdot\mathbf{r}\right)\Big|_{z=0} = \left(\mathbf{k}_{r}\cdot\mathbf{r}\right)\Big|_{z=0} = \left(\mathbf{k}_{t}\cdot\mathbf{r}\right)\Big|_{z=0},$$
(1.11)

en donde se ha utilizado que las ondas tienen la misma frecuencia angular. En la Fig 1.2, se orientan los ejes de tal forma que \mathbf{k}_i se encuentra en el plano XZ. Puesto que la condición en la Ec. (1.11) se debe cumplir para todo punto en la interfaz, sigue siendo cierta si x = 0 o y = 0. Por tanto, al considerar que $k_{yi} = 0$, se concluye que [50]

$$k_i \sin \theta_i = k_r \sin \theta_r = k_t \sin \theta_t. \tag{1.12}$$

Dado que las ondas incidente y reflejada se propagan dentro del mismo medio, se tiene que $k_i = k_r$, por lo cual [51]

$$\theta_i = \theta_r. \tag{1.13}$$

Por otro lado, en el caso de la onda transmitida, se tiene que $k_i = n_i k_t / n_t$, y utilizando la Ec. (1.12) se obtiene que [51]

$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t. \tag{1.14}$$

La Ec. (1.13) se conoce como la *ley de reflexión*, mientras que la Ec. (1.14) se conoce como la *ley de Snell*², y a partir de ellas, se puede determinar la dirección de las ondas reflejada y transmitida.

Los coeficientes de amplitud de reflexión r y de transmisión t se definen como el cociente de las amplitudes del campo eléctrico reflejado E_{0r} , y transmitido E_{0t} , entre la magnitud del campo eléctrico incidente E_{0i} . Existen dos casos relevantes: cuando E_i es paralelo al plano de incidencia (polarización p) y cuando es perpendicular (polarización s). Para determinar las amplitudes de cada campo eléctrico se utilizan las condiciones de frontera. En específico, se debe cumplir que las componentes tangenciales a la interfaz tanto del campo eléctrico como del campo B/μ sean continuas.

Polarización s

En primer lugar, se analiza el caso donde \mathbf{E}_i oscila en la dirección perpendicular al plano de incidencia [Fig. 1.3(a)]. Se considera que las orientaciones de los campos eléctricos reflejados (\mathbf{E}_r) y transmitido (\mathbf{E}_t) son iguales a la orientación del campo eléctrico incidente (\mathbf{E}_i). Usando que las componentes tangenciales, respecto a la interfaz, del campo \mathbf{E} son continuas, al igual que las componentes tangenciales de \mathbf{B}/μ , la relación E = (c/n) B, y las leyes de reflexión [Ec. (1.13)] y de Snell [Ec. (1.14)], se obtienen las

 $^{^{2}}$ La ley de Snell fue nombrada en honor de Willebrord Snellius, sin embargo fue descrita por primera vez por el científico persa Ibh Sahl en el año 984.

expresiones de los coeficientes de reflexión r_s y transmisión t_s para polarización s [51]:

$$r_{s} = \frac{n_{i}\cos\theta_{i} - \sqrt{n_{t}^{2} - n_{i}^{2}\sin^{2}\theta_{i}}}{n_{i}\cos\theta_{i} + \sqrt{n_{t}^{2} - n_{i}^{2}\sin^{2}\theta_{i}}},$$
(1.15a)

$$t_s = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + \sqrt{n_t^2 - n_i^2 \sin^2 \theta_i}},$$
(1.15b)

Polarización p

Para el caso donde el campo eléctrico es paralelo al plano de incidencia, las expresiones de los coeficientes r_p y t_p se derivan considerando la ley de reflexión y que las componentes tangenciales de $\mathbf{E} (E_{0i} \cos \theta_i - E_{0r} \cos \theta_r = E_{0t} \cos \theta_t)$ y \mathbf{B}/μ son continuas. En esta configuración, la orientación del campo \mathbf{B} es la que se mantiene después de ser reflejado transmitido [ver Fig. 1.3(b)]. Por tanto, los coeficientes de reflexión y transmisión para polarización p están dados por [51]:

$$r_{p} = \frac{n_{t}^{2} \cos \theta_{i} - n_{i} \sqrt{n_{t}^{2} - n_{i}^{2} \sin^{2} \theta_{i}}}{n_{t}^{2} \cos \theta_{i} + n_{i} \sqrt{n_{t}^{2} - n_{i}^{2} \sin^{2} \theta_{i}}},$$
(1.16a)

$$t_p = \frac{2n_i n_t \cos \theta_i}{n_t^2 \cos \theta_i + n_i \sqrt{n_t^2 - n_i^2 \sin^2 \theta_i}}.$$
(1.16b)

Las Ecs. (1.15) y (1.16) se obtuvieron a partir de la identidad $\cos^2 \theta_t = 1 - \sin^2 \theta_t$ y de la ley de Snell [Ec. (1.14)]. Es importante destacar que los coeficientes de reflexión y transmisión obtenidos en las Ecs. (1.15) y (1.16) consideran que los medios de incidencia y transmisión son no magnéticos, es decir, $\mu_i \approx \mu_t \approx \mu_0$ [51].



Fig. 1.3: Diagramas de una onda plana linealmente polarizada con vector de onda \mathbf{k}_i y ángulo de incidencia θ_i . Se consideran dos medios lineales, isótropos y homogéneos. El medio inicial tiene propiedades electromagnéticas ϵ_i , μ_i , mientras que para el medio de transmisión se tiene ϵ_t , μ_t . En los casos de polarización (**a**) *s* y (**b**) *p* se asume que los campos reflejados y trasmitidos no tienen una diferencia de fase respecto a los incidentes.

La luz puede propagarse de un medio a otro que es ópticamente más denso $(n_i < n_t, incidencia externa)$ o, en el caso contrario, pasar a un medio con densidad óptica menor $(n_i > n_t, incidencia interna)$. En la Fig. 1.4 se presenta un ejemplo del comportamiento de los coeficientes r y t en función del ángulo de incidencia para incidencia externa [Fig. 1.4(a)] e interna [Fig. 1.4(b)]. Los índices de refracción

CAPÍTULO 1 • TEORÍA

considerados corresponden al aire (n = 1) y al vidrio (n = 1.5). En el caso de incidencia externa, ambos coeficientes de transmisión [líneas punteadas en la Fig. 1.4(a)] y el coeficiente r_s [línea continua azul en la Fig. 1.4(a)] no cambian de signo, mientras que r_p tiene un cambio de signo, por lo que existe un valor para el cual $r_p = 0$. Dicho ángulo se conoce como *ángulo de Brewster*, denotado como θ_B . Más adelante se discutirá su relevancia y origen. En este ejemplo particular de la interfaz aire–vidrio, el valor del ángulo de Brewster es $\theta_B \approx 56.3^\circ$. En incidencia interna, los coeficientes son complejos, por ello, se grafica su parte real [gráfica superior en la Fig. 1.4(b)] e imaginaria [gráfica inferior en la Fig. 1.4(b)]. En este caso, también se obtiene un ángulo de Brewster en 33.69°. Por otra parte, se observa que la parte imaginaria de los coeficientes son cero para ángulos menores a θ_c . Este ángulo se conoce como *ángulo crítico*, y sólo se observa en incidencia interna; en una interfaz vidrio–aire, su valor es 41.8°. A partir de este ángulo aparece el fenómeno de reflexión total interna, donde toda la luz incidente es reflejada [52].



Fig. 1.4: Coeficientes de reflexión (líneas continuas) y transmisión (líneas punteadas) en función del ángulo de incidencia θ_i para los casos de incidencia (a) externa e (b) interna. La polarización s se denota con azul y la p con rojo. El ángulo de Brewster se señala con θ_B y al ángulo crítico con θ_c . Los medios de propagación que se consideraron fueron el aire (n = 1) y vidrio (n = 1.5). En (b) la gráfica superior corresponde a las partes reales de los coeficientes de reflexión y transmisión (Re[r], Re[t]), mientras la gráfica en la parte inferior corresponde a la parte imaginaria (Im[r], Im[t]).

A través del vector de Poynting [Ec. (1.7)] se define a la *irradiancia*, que corresponde al promedio de energía por unidad de tiempo que cruza una unidad de área normal al vector S. La irradiancia permite analizar el comportamiento de la energía transportada por una onda EM después de incidir sobre una interfaz plana. En particular, para un haz de luz con sección transversal circular que ilumina una región de área *A* de una superficie plana (Fig. 1.5), la irradiancia está dada como [51]

$$I = \langle S \rangle_T = \frac{nc\epsilon_0}{2} E_0^2, \tag{1.17}$$

donde $\langle \cdots \rangle_T$ indica el promedio temporal. En la Fig. 1.5 se ilustra un haz de sección transversal circular que incide sobre un área A con un ángulo θ_i respecto a la normal a la superficie. Por tanto, la sección transversal del haz incidente corresponde a $A \cos \theta_i$. De forma análoga, se calcula que las secciones transversales de los haces reflejado y transmitido son $A \cos \theta_r$ y $A \cos \theta_t$, respectivamente. A través de las secciones transversales se calcula para cada uno de los haces la potencia—energía por unidad de tiempo—asociada. Para ello, se multiplica la irradiancia por la sección transversal. Para el campo EM incidente, la potencia es [51]

$$P_i = I_i A \cos \theta_i, \tag{1.18}$$

de forma similar, se calcula la potencia para los campos reflejado y transmitido. La reflectancia, R, y la transmitancia, T, se definen como la potencia transportada por los haces reflejado y transmitido, respectivamente, normalizados por la potencia incidente [Ec. (1.18)] [51]:

$$R \equiv \frac{I_r A \cos \theta_r}{I_i A \cos \theta_i} = \frac{I_r}{I_i},\tag{1.19}$$



Fig. 1.5: Haz de luz con sección transversal circular que incide sobre una interfaz plana que separa a los dos medios con índices de refracción n_i y n_t . El haz incidente, con vector de onda \mathbf{k}_i , forma un ángulo θ_i respecto a la normal de la interfaz (línea punteada) e ilumina un área A. El haz reflejado se propaga en la dirección \mathbf{k}_r y forma un ángulo θ_r respecto la normal; la sección transversal asociada al haz reflejado es $A \cos \theta_r$. Análogamente, el haz transmitido, con vector de onda \mathbf{k}_t , tiene una sección transversal $A \cos \theta_t$.

у

$$T \equiv \frac{I_t A \cos \theta_t}{I_i A \cos \theta_i}.$$
(1.20)

Por otro lado, de la Ec. (1.17) se obtiene que I_r/I_i es igual a $(n_r c \epsilon_0 E_{0r}^2/2) / (n_i c \epsilon_0 E_{0i}^2/2)$. Puesto que el haz incidente y el reflejado se propagan en el mismo medio, es decir, $n_i = n_r$, la expresión para la reflectancia se reduce a [51]

$$R = \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}}\right)^2 = rr^*,\tag{1.21}$$

donde * denota el complejo conjugado. Análogamente, I_t/I_i es igual a $(n_t c \epsilon_0 E_{0t}^2/2) / (n_i c \epsilon_0 E_{0i}^2/2)$, por lo tanto, al sustituir en la Ec. (1.20), se obtiene que la transmitancia es [51]

$$T = \frac{n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i} \left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}}\right)^2 = \left(\frac{n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i}\right) tt^*.$$
(1.22)

En las Figs. 1.6 se grafican la reflectancia (líneas continuas) y transmitancia (líneas punteadas) en función del ángulo de incidencia para la interfaz aire-vidrio, considerando ambas polarizaciones. El caso de incidencia externa se muestra en la Fig. 1.6(a), donde se obtiene que, para polarización p, en el ángulo de Brewster, la reflectancia es cero, mientras que la transmitancia alcanza su máximo. Por tanto, si incide luz con polarización p con un ángulo de incidencia igual al ángulo de Brewster, sólo se presenta el haz transmitido y desaparece el reflejado. En cambio, si la luz incidente se compone de ambos estados de polarización, el haz reflejado se polarización s sí es reflejada, como se observa en el cálculo de R_s [línea azul en la Fig. 1.6(a)]. Otra característica es que la suma de la transmitancia y reflectancia, para cada polarización, es igual a la unidad en cada ángulo de incidencia; esta relación sólo es válida cuando se desprecian las pérdidas por absorción (A). En general, las funciones dieléctricas son cantidades complejas, por tanto, el índice de refracción también lo es. La parte imaginaria de la función dieléctrica se asocia a pérdidas por absorción. En tal caso, la relación que se cumple es

$$R + T + A = 1. (1.23)$$

CAPÍTULO 1 • TEORÍA

En la Fig. 1.6(b), en las gráficas para la reflectancia y transmitancia en incidencia interna, se identifican tanto al ángulo de Brewster, θ_B , como al ángulo crítico, θ_c . Se observa que, para valores del ángulo de incidencia mayores a θ_c , la transmitancia para ambas polarizaciones es cero y que la luz se refleja completamente.



Fig. 1.6: Reflectancia (líneas continuas) y transmitancia (líneas punteadas) en función del ángulo de incidencia θ_i para los casos de incidencia (a) externa y (b) interna. La polarización s se denota con azul y la p con rojo. El ángulo de Brewster se señala con θ_B y el ángulo crítico con θ_c . Los medios de propagación que se consideraron fueron el vacío, n = 1, y vidrio, n = 1.5.

1.2.1 Ángulo de Brewster

Las fórmulas de Fresnel predicen un ángulo para el cual la reflectancia es nula, conocido como ángulo de Brewster, θ_B , y para medios lineales, homogéneos e isótropos se encuentra presente sólo para polarización p. Haciendo uso de la ley de Snell [Ec. (1.14)], los coeficientes R_s y R_p se reescriben en términos de los ángulos θ_i y θ_t , obteniendo [51]

$$R_p = \frac{\tan^2\left(\theta_i - \theta_t\right)}{\tan^2\left(\theta_i + \theta_t\right)},\tag{1.24a}$$

$$R_s = \frac{\sin^2\left(\theta_i - \theta_t\right)}{\sin^2\left(\theta_i + \theta_t\right)}.$$
(1.24b)

Cabe mencionar que en ambas expressiones se considera que los medios de propagación son no magnéticos. Por otra parte, el denominador de la Ec. (1.24a) tiende a infinito cuando $\theta_i + \theta_t = \pi/2$, por tanto, para ese valor de ángulo de incidencia, $R_p = 0$. En contraste, se puede observar de la Ec. (1.24b), que para polarización s no existe un ángulo de incidencia en el cual la reflectancia sea nula. En consecuencia, si la onda incidente contiene ambos estados de polarización, bajo estas condiciones, el haz reflejado estará completamente polarizado. La ley de reflexión establece que $\theta_i = \theta_r$, por tanto, si la onda incide con un ángulo igual al ángulo de Brewster, se cumple que $\theta_B = \theta_r$. Entonces se cumple que el haz transmitido es ortogonal al haz reflejado ($\theta_B + \theta_t = \pi/2$). Es importante señalar que el valor del ángulo de Brewster cambia según los materiales que compongan a los medios de incidencia y transmisión, puesto que θ_B depende no sólo de las propiedades ópticas de cada material, sino también de si se trata de incidencia externa o interna [51]. Su dependencia se comprueba utilizando la ley de Snell [Ec. (1.14)], suponiendo que $\theta_i = \theta_B$:

$$\sin \theta_B = \frac{n_t}{n_i} \sin \theta_t = \frac{n_t}{n_i} \sin \left(\frac{\pi}{2} - \theta_B\right) = \frac{n_t}{n_i} \cos \theta_B, \tag{1.25}$$

por tanto,

$$\tan \theta_B = \frac{n_t}{n_i}.$$
 (1.26)

La relación en la Ec. (1.26) se conoce como *ley de Brewster*, nombrada en honor de David Brewster, quien la describió en el siglo XIX [53]. El fenómeno de Brewster consiste en la existencia de un ángulo particular para el cual la componente de la luz con polarización p se transmite en su totalidad, anulando su reflexión. Cabe destacar que el haz transmitido está parcialmente polarizado, por el contrario, el haz reflejado contiene solamente componentes con polarización s [52]. Cuando los índices de refracción son mayores a la unidad y no hay pérdidas dentro de los materiales, el ángulo de Brewster está acotado entre 45° y 90° [53]. En la Fig. 1.7(a) se ilustra el efecto descrito por Brewster: luz no polarizada (cuyos vectores de polarización se indican con flechas negras) incide sobre una interfaz plana con un ángulo de incidencia θ_B . Los haces resultantes se indican con rojo para el reflejado y azul para el transmitido. La onda EM que conforma al haz reflejado contiene sólo componentes del campo eléctrico perpendiculares al plano de incidencia, en el esquema se indican con flechas verticales en rojo. Por tanto, la luz reflejada está polarizada. En cambio, el haz transmitido, que forma un ángulo recto respecto al haz reflejado, contiene componentes del campo eléctrico tanto perpendiculares como paralelas al plano de incidencia (flechas azules). Por ello, es luz parcialmente polarizada.

La interpretación microscópica del efecto Brewster está relacionada con los dipolos eléctricos que la onda EM induce dentro del material [19, 51]. Cuando la onda incidente interactúa con la interfaz entre ambos medios, se producen ondas EM tanto en el medio de incidencia (reflejada) como en el de trasmisión (trasmitida). La onda transmitida induce dipolos eléctricos dentro del material. Los cuales tienen asociado un momento dipolar eléctrico p, cuya dirección es paralela al vector de campo eléctrico. Por tanto, el momento dipolar eléctrico es perpendicular a la dirección de propagación de la onda. De acuerdo al patrón de radiación de un dipolo eléctrico, en la dirección que apunta p la radiación es nula [curva violeta en Fig. 1.7(b)]. En consecuencia, si el haz reflejado y el haz transmitido son ortogonales entre sí, p es paralelo al vector de onda del haz reflejado, k_r . Por consiguiente, no habrá radiación en la dirección de propagación de la luz reflejada. Por tanto, la reflexión es nula. Por otro lado, cuando el campo eléctrico de la onda incidente es perpendicular al plano de incidencia (polarización *s*), el vector p también es perpendicular al plano de incidencia, ver Fig. 1.7(c). El patrón de radiación de los dipolos eléctricos inducidos dentro del material se muestra con la línea violeta en la Fig. 1.7(c); sobre el plano de incidencia, el dipolo eléctrico radia de igual forma en todas las direcciones. Por tanto, no existe una dirección sobre el plano de incidencia en la que la radiación dipolar sea nula y se logre el efecto Brewster [51].



Fig. 1.7: (a) Luz no polarizada (flechas negras) incidiendo sobre un material con ángulo de incidencia $\theta_i = \theta_B$. La polarización del haz reflejado (flechas rojas) tiene polarización *s*, mientras que el haz transmitido (flechas azules) está parcialmente polarizado. La normal a la interfaz es $\hat{\mathbf{e}}_n$. (b) El campo eléctrico incidente \mathbf{E}_i de la onda que se propaga en la dirección \mathbf{k}_i (flechas verdes) se transmite (el vector de onda asociado es \mathbf{k}_t) e induce dipolos eléctricos dentro del material, cada uno con un momento dipolar eléctrico \mathbf{p} asociado. Cuando la onda EM incidente está polarizada paralela al plano de incidencia (polarización *p*) y $\theta_i = \theta_B$, la radiación del dipolo (curva violeta) es cero en la dirección de propagación de la onda reflejada, puesto que \mathbf{k}_r es paralelo a \mathbf{p} . (c) Con una onda polarizada paralela al plano de incidencia (polarizada paralelo a \mathbf{p} . (c) con una onda polarizada paradel el patrón de radiación del dipolo eléctrico sea nula (curva morada). Por tanto, el efecto Brewster no es posible.

2 ESPARCIMIENTO POR UNA PARTÍCULA ESFÉRICA AISLADA

La interacción de luz con la materia es un fenómeno común que puede ser observado fuera de un laboratorio: los colores de cada objeto, la presencia del arcoíris, las diferentes tonalidades del atardecer, son algunos ejemplos. En general, la materia extingue la luz que le incide, es decir, la puede tanto absorber como esparcir, y para una partícula con geometría arbitraria, calcular la extinción puede ser un problema no trivial [2]. En 1908 Gustav Mie desarrolló una solución analítica para el esparcimiento de una partícula esférica [54]. Antes de la publicación de Mie, autores como F. Hasenörl, L. Lorenz y P. Debye [55] desarrollaron trabajos sobre el esparcimiento por partículas—el artículo de Hasenörl contenía la solución completa que tiempo después Mie publicó—. El trabajo de Mie sobresale, ya que dio ejemplos prácticos del problema de esparcimiento y a que la solución que desarrolló permite realizar cálculos numéricos. Con la aparición de las computadoras fue posible la implementación de esta solución que resuelve el problema de esparcimiento por partículas esféricas [55]. La solución fue nombrada en honor de Mie como *teoría de Mie*. Sin embargo, un nombre más apropiado sería *solución de Mie*, ya que representa la solución a las ecuaciones de Maxwell imponiendo condiciones de contorno esféricas. Por tanto, como se mencionó anteriormente, en el resto de la tesis se utilizará el nombre *solución de Mie*.

El problema de esparcimiento por una partícula individual de forma y tamaño arbitrarios, consiste en calcular los campos EMs esparcidos en todo punto del espacio (dentro y fuera de la partícula). En la Fig. 1.8 se ilustra el caso de una partícula aislada sobre la que incide una onda plana monocromática cuya dirección de propagación es paralela a $\hat{\mathbf{e}}_z$. Para que la onda plana sea solución a las ecuaciones de Maxwell, se debe cumplir la relación de dispersión: $\omega = ck$, con c la velocidad de la luz, k el número de onda y ω la frecuencia angular. El campo eléctrico asociado a la onda plana incidente se puede escribir como [1]

$$\mathbf{E}_{i} = \left(E_{xi}^{'}\hat{\mathbf{e}}_{x} + E_{yi}^{'}\hat{\mathbf{e}}_{y}\right)e^{(ikz-i\omega t)} = \left(E_{xi}\hat{\mathbf{e}}_{x} + E_{yi}\hat{\mathbf{e}}_{y}\right).$$
(1.27)

Por simplicidad, la fase temporal $e^{-i\omega t}$ en la expressión del campo eléctrico se omitirá en lo subsecuente y el término espacial e^{ikz} se absorbe en los coeficientes de amplitud del campo $(E_{xi} \ y \ E_{yi})$. Es posible definir un plano análogo al plano de incidencia definido en problemas de reflexión de luz por una interfaz plana [1]. Para ello, se consideran los vectores $\hat{\mathbf{e}}_r$ (dirección de esparcimiento) y $\hat{\mathbf{e}}_z$. El plano que forman ambos vectores se denomina *plano de esparcimiento* [1] y se muestra en color rosa en la Fig. 1.8.



Fig. 1.8: Partícula de forma y tamaño arbitrarios sobre la que incide una onda plana monocromática con vector de onda \mathbf{k}_i (paralelo al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$). El plano de esparcimiento, definido por los vectores $\hat{\mathbf{e}}_r$ y $\hat{\mathbf{e}}_z$, se muestra en color rosa. Los vectores base definidos a partir del plano de esparcimiento ($\hat{\mathbf{e}}_{\parallel i}, \hat{\mathbf{e}}_{\perp s}, \hat{\mathbf{e}}_{\parallel s}$ y $\hat{\mathbf{e}}_{\perp s}$) se denotan con flechas de color verde. También se incluyen los sistemas de coordenadas cartesianas (flechas azules) y esférico (flechas moradas).

El plano de esparcimiento permite definir un nuevo sistema de coordenadas que sirve para relacionar los campos incidente y esparcido. Para ello, primero se expresa al campo eléctrico incidente en términos de sus componentes paralela $(E_{\parallel i})$ y perpendicular $(E_{\perp i})$ al plano de esparcimiento. Se definen los vectores $\hat{\mathbf{e}}_{\parallel i}$ y $\hat{\mathbf{e}}_{\perp i}$ (ver Fig. 1.8), cuya relación con la base cartesiana es [1]

$$\hat{\mathbf{e}}_{\parallel i} = \cos(\phi)\hat{\mathbf{e}}_x + \sin(\phi)\hat{\mathbf{e}}_y \quad \mathbf{y} \quad \hat{\mathbf{e}}_{\perp i} = \sin(\phi)\hat{\mathbf{e}}_x - \cos(\phi)\hat{\mathbf{e}}_y.$$
(1.28)

A partir de las Ecs. (1.28) se obtienen los vectores unitarios cartesianos: $\hat{\mathbf{e}}_x = \cos(\phi)\hat{\mathbf{e}}_{\parallel i} + \sin(\phi)\hat{\mathbf{e}}_{\perp i}$ y $\hat{\mathbf{e}}_y = \sin(\phi)\hat{\mathbf{e}}_{\parallel i} - \cos(\phi)\hat{\mathbf{e}}_{\perp i}$, por lo que se puede reescribir el campo incidente como:

$$\mathbf{E}_{i} = E_{xi}\mathbf{\hat{e}}_{x} + E_{yi}\mathbf{\hat{e}}_{y} = (E_{xi}\sin\phi - E_{yi}\cos\phi)\mathbf{\hat{e}}_{\perp i} + (E_{xi}\cos\phi + E_{yi}\sin\phi)\mathbf{\hat{e}}_{\parallel i} = E_{\parallel i}\mathbf{\hat{e}}_{\parallel i} + E_{\perp i}\mathbf{\hat{e}}_{\perp i}.$$
(1.29)

Para el caso del campo esparcido por la partícula es relevante el caso del campo lejano. Es decir, la región en donde el campo eléctrico tiene un comportamiento proporcional a r^{-1} y cumple la relación $kr \gg 1$. En la región de campo lejano y en ausencia de fuentes, el campo eléctrico es transversal a la dirección de propagación. Por tanto, el campo eléctrico esparcido \mathbf{E}_s se escribe como [1]

$$\mathbf{E}_s \sim \frac{e^{ikr}}{-ikr} \mathbf{X},\tag{1.30}$$

con $\hat{\mathbf{e}}_r \cdot \mathbf{X} = 0$. Al vector \mathbf{X} se le conoce como vector de amplitud de esparcimiento. A partir del plano de esparcimiento se definen los vectores $\hat{\mathbf{e}}_{\parallel s}$ (paralelo al plano de esparcimiento) y $\hat{\mathbf{e}}_{\perp s}$ (normal al plano), ver Fig. 1.8. Ambos vectores se relacionan con la base de coordenadas esféricas [1]:

$$\hat{\mathbf{e}}_{\parallel s} = \hat{\mathbf{e}}_{\theta} \quad \mathbf{y} \quad \hat{\mathbf{e}}_{\perp s} = -\hat{\mathbf{e}}_{\phi}. \tag{1.31}$$

Puesto que $\hat{\mathbf{e}}_{\perp s}$ y $\hat{\mathbf{e}}_{\parallel s}$ forman una base, el campo eléctrico esparcido en la región de campo lejano se escribe en términos de sus componentes paralela y perpendicular al plano de esparcimiento como [1]

$$\mathbf{E}_s = E_{\parallel s} \mathbf{\hat{e}}_{\parallel s} + E_{\perp s} \mathbf{\hat{e}}_{\perp s}.$$
 (1.32)

Es posible relacionar a los campos incidente y esparcido (debido a que las ecuaciones de Maxwell son lineales) por medio del operador de esparcimiento de campo lejano \hat{F} [56]:

$$\mathbf{E}_{s} = \frac{e^{ik_{s}r}}{r}\hat{F}(\mathbf{k}_{s}, \mathbf{k}_{i})E_{i}\hat{\mathbf{e}}_{\alpha}, \qquad (1.33)$$

donde $\hat{\mathbf{e}}_{\alpha}$ es un vector perpendicular al vector de onda del campo esparcido \mathbf{k}_s . A partir del comportamiento del campo eléctrico esparcido en la región de campo lejano [Ec. (1.30)] y de la Ec. (1.33), se concluye que la relación entre las componentes paralelas y perpendiculares de los campos esparcido e incidente, en la base de los vectores definidos a partir del plano de esparcimiento, es [1]

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel s} \\ E_{\perp s} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & S_3 \\ S_4 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel i} \\ E_{\perp i} \end{pmatrix},$$
(1.34)

donde los elementos S_j (j = 1, 2, 3 y 4) conforman la *matriz de esparcimiento*. Los elementos S_j son funciones tanto del ángulo de esparcimiento θ como del ángulo azimutal ϕ , y están relacionados con el vector X de la siguiente manera [1]:

$$\mathbf{X} = (S_2 \cos \phi + S_3 \sin \phi) \,\hat{\mathbf{e}}_{\parallel s} + (S_4 \cos \phi + S_1 \sin \phi) \,\hat{\mathbf{e}}_{\perp s}. \tag{1.35}$$

A partir del vector de amplitud de esparcimiento se calcula la sección transversal diferencial de esparcimiento ($|\mathbf{X}|^2/k^2$), la cual permite conocer la distribución angular de la luz esparcida por una partícula de forma y tamaño arbitrarios [1].

2.1 Solución de Mie

En el caso particular de esparcimiento debido a una partícula esférica aislada de radio *a* (arbitrario) sobre la que incide una onda EM plana monocromática (\mathbf{E}_i , \mathbf{H}_i), es posible determinar de forma analítica los campos esparcidos tanto fuera (\mathbf{E}_{scat} , \mathbf{H}_{scat}) como dentro de la partícula (\mathbf{E}_{int} , \mathbf{H}_{int}). La Fig. 1.9 muestra esquemáticamente el problema. Sin pérdida de generalidad, se eligió una onda EM plana propagándose en la dirección $\hat{\mathbf{e}}_z$ y polarizada en $\hat{\mathbf{e}}_x$. La simetría del problema sugiere el uso de coordenadas esféricas para su resolución. Las ecuaciones de onda vectoriales (ecuaciones de Helmholtz) son [1]:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \tag{1.36a}$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0, \tag{1.36b}$$

con $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$, donde ω corresponde a la frecuencia angular de la onda EM que se propaga en un medio con función dieléctrica relativa ϵ y permeabilidad magnética μ . Además, el campo H cumple que $\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu$. Para construir la solución a las Ecs. (1.36) conviene definir dos funciones vectoriales de la forma

$$\mathbf{M} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{r}\boldsymbol{\psi},\tag{1.37}$$

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{V} \times \mathbf{M}}{k},\tag{1.38}$$

en donde ψ es una función escalar y r es el vector posición en coordenadas esféricas, tales que satisfacen las Ecs. (1.36a) y (1.36b) siempre que ψ sea solución a la ecuación de onda escalar [1]:

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0, \tag{1.39}$$

que en coordenadas esféricas se escribe como

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + k^2\psi = 0.$$
(1.40)

Por consiguiente, el problema se reduce a calcular las soluciones de la ecuación de onda escalar en coordenadas esféricas, dadas por [1]:

$$\psi_{emn} = \cos(m\phi) P_n^m(\cos\theta) z_n(kr), \qquad (1.41a)$$

$$\psi_{omn} = \sin(m\phi) P_n^m(\cos\theta) z_n(kr), \qquad (1.41b)$$

donde $P_n^m(\cos\theta)$ son las funciones asociadas de Legendre [1]. Las soluciones de la ecuación de onda escalar ψ_{emn} y ψ_{omn} contienen a z_n , una función esférica de Bessel, ya sea j_n , y_n o una combinación lineal de ellas: $h_n^{(1)} = j_n + iy_n^3$.

En las Ecs. (1.41) la paridad de la función ψ se denota con los subíndices *e* para par (del inglés *even*) y *o* para impar (del inglés *odd*). A partir de las Ecs. (1.41) se construyen las soluciones a la ecuación de

³Las funciones de Hankel $h_n^{(1)}$ y $h_n^{(2)} = j_n - iy_n$ tienen comportamientos asintóticos cuando $kr \gg n^2$ [1]:

$$h_n^{(1)} \sim \frac{(-i)^n e^{ikr}}{ikr},$$
 (1.42)

$$h_n^{(2)} \sim \frac{(i)^n e^{-ikr}}{ikr}.$$
 (1.43)

La Ec. (1.42) corresponde a una onda esférica saliente mientras que la Ec. (1.43) representa una onda esférica entrante. En la solución de Mie se utiliza sólo $h_n^{(1)}$, pues para puntos lejanos de la partícula el campo esparcido corresponde a una onda esférica que se aleja. Por ello, en las funciones generadoras ψ_{emn} y ψ_{omn} sólo se usa $h_n^{(1)}$ para determinar el campo esparcido.



Fig. 1.9: Partícula esférica iluminada por una onda plana monocromática $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$ con vector de onda \mathbf{k}_i , que produce campos EMs dentro $(\mathbf{E}_{int}, \mathbf{H}_{int})$ y fuera $(\mathbf{E}_{scat}, \mathbf{H}_{scat})$ de la partícula. El campo esparcido está en dirección \mathbf{k}_{scat} . Los índices de refracción de los materiales que componen a la partícula y a la matriz están denotados con N_1 y N, respectivamente.

onda vectorial en coordenadas esféricas⁴:

$$\mathbf{M}_{emn} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi_{emn}), \quad \mathbf{M}_{omn} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi_{omn}), \tag{1.45}$$

$$\mathbf{N}_{emn} = \frac{\nabla \times (\mathbf{M}_{emn})}{k}, \ \mathbf{N}_{omn} = \frac{\nabla \times (\mathbf{M}_{omn})}{k}.$$
 (1.46)

Las funciones vectoriales definidas en las Ecs. (1.45) y (1.46) son los armónicos esféricos vectoriales, donde ψ es la función generadora y r el vector piloto. Los armónicos esféricos vectoriales M y N cuentan con las propiedades necesarias para representar a un campo EM porque tienen divergencia igual a cero, el rotacional de uno de ellos es proporcional al otro y cumplen la ecuación de Helmholtz [1]. Como consecuencia, es posible escribir a los campos EMs incidente, interno y esparcido por una partícula esférica (ver Fig. 1.9) en términos de una serie de M y N. Para el campo incidente, la expansión tiene la siguiente forma [1]

$$\mathbf{E}_{i} = \sum_{n=1}^{\infty} E_{n} \left(\mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i \mathbf{N}_{e1n}^{(1)} \right),$$
(1.47)

$$\mathbf{H}_{i} = -\frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_{n} \left(\mathbf{M}_{e1n}^{(1)} + i \mathbf{N}_{o1n}^{(1)} \right), \qquad (1.48)$$

en donde $E_n = E_0 i^n (2n+1)/[n(n+1)]$ y E_0 es la amplitud de la onda EM incidente. La condición de frontera de los campos EMs⁵ sobre la superficie esférica de la partícula y la ortogonalidad de los

$$\mathbf{L} = \psi \hat{\mathbf{e}}_r. \tag{1.44}$$

$$(\mathbf{E}_{ ext{fuera}} - \mathbf{E}_{ ext{dentro}}) imes \mathbf{\hat{e}}_n = (\mathbf{H}_{ ext{fuera}} - \mathbf{H}_{ ext{dentro}}) imes \mathbf{\hat{e}}_n = \mathbf{0},$$

donde $\hat{\mathbf{e}}_n$ es el vector normal a la superficie de la partícula.

 $^{^{4}}$ La base completa que permite escribir las soluciones a las ecuaciones de Maxwell imponiendo condiciones de contorno esféricas se compone de tres armónicos esféricos vectoriales: M, N y L, éste último definido como [57]

La componente longitudinal del campo EM estará dada por \mathbf{L} , mientras que las componentes transversales se relacionan con \mathbf{M} y \mathbf{N} .

⁵Suponiendo que no hay corrientes externas, sobre la superficie de la partícula las componentes tangenciales de los campos \mathbf{E} y \mathbf{H} son continuas, es decir:

CAPÍTULO 1 • TEORÍA

armónicos esféricos vectoriales rigen la forma para los campos interno y esparcido, de modo que ninguno tiene contribuciones de los términos con $m \neq 1$. El campo dentro de la partícula se propone como [1]:

$$\mathbf{E}_{int} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(c_n \mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i d_n \mathbf{N}_{e1n}^{(1)} \right),$$
(1.49)

$$\mathbf{H}_{int} = \frac{k}{\omega\mu_p} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(d_n \mathbf{M}_{e1n}^{(1)} + i c_n \mathbf{N}_{o1n}^{(1)} \right),$$
(1.50)

en donde μ_p es la permeabilidad del material del que está hecha la partícula. En las Ecs. (1.49) y (1.50) se agrega el superíndice ⁽¹⁾ a los armónicos esféricos vectoriales para denotar que la función radial z_n a usar es $j_n(k_p r)$, con k_p el número de onda dentro de la partícula. Esta elección se debe a que la función $j_n(k_p r)$ no presenta singularidades en la región interior de la partícula, contrario al comportamiento de y_n que diverge en el origen (centro de la partícula esférica).

Por otro lado, el campo esparcido se escribe de la siguiente manera [1]

$$\mathbf{E}_{scat} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i a_n \mathbf{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \mathbf{M}_{o1n}^{(3)} \right),$$
(1.51)

$$\mathbf{H}_{scat} = \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i b_n \mathbf{N}_{o1n}^{(3)} + a_n \mathbf{M}_{e1n}^{(3)} \right), \qquad (1.52)$$

donde el superíndice ⁽³⁾ denota que la dependencia radial de los armónicos esféricos vectoriales es a través de $h_n^{(1)}(kr)$. Dado que la partícula se encuentra centrada en el origen y el campo EM esparcido se encuentra definido solamente en el exterior de la partícula, ambas funciones j_n y y_n pueden ser utilizadas. Por otro lado, los coeficientes que aparecen en las Ecs. (1.49)–(1.52) se calculan a partir de la continuidad de las componentes tangenciales de los campos E y H en la superficie de la partícula. Los coeficientes a_n y b_n , conocidos como coeficientes de Mie o de esparcimiento, están dados por [1]

$$a_n = \frac{m\psi_n(mx)\psi'_n(x) - \mu_1\psi_n(x)\psi'_n(mx)}{m\psi_n(mx)\xi'_n(x) - \mu_1\xi_n(x)\psi'_n(mx)},$$
(1.53a)

$$b_n = \frac{\mu_1 \psi_n(mx) \psi'_n(x) - m\psi_n(x) \psi'_n(mx)}{\mu_1 \psi_n(mx) \xi'_n(x) - m\xi_n(x) \psi'_n(mx)},$$
(1.53b)

donde $\psi_n(\rho)$ y $\xi_n(\rho)$ son las funciones de Riccati–Bessel⁶ definidas como

$$\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho), \qquad \xi_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho).$$
 (1.54)

La prima indica derivada respecto al argumento de la función. En las Ecs. (1.53a) y (1.53b) se emplean el parámetro de tamaño x y el índice de refracción relativo m, dados por:

$$x = ka = \frac{2\pi a n_m}{\lambda}, \qquad m = \frac{k_p}{k} = \frac{n_p}{n_m},\tag{1.55}$$

⁶Los coeficientes de esparcimiento pueden ser escritos en términos de las funciones esféricas de Bessel o de las funciones de Riccati–Bessel. Estas últimas se prefieren, puesto que representan una versión más simplificada y ofrecen una alternativa más estable para los cálculos numéricos de los coeficientes de Mie, dados por las Ecs. (1.53) [1].

con λ la longitud de onda del haz incidente en la matriz. n_p representa al índice de refracción complejo del material del que está hecha la partícula y depende de la frecuencia. El material de la matriz se considera no absorbente y tiene un índice de refracción n_m .

La solución obtenida para el campo eléctrico esparcido por la partícula, Ec. (1.51), consiste en una serie de multipolos eléctricos y magnéticos que son excitados por la onda EM incidente [58]. Los armónicos esféricos vectoriales M y N usados en la expresión para el campo esparcido corresponden a los modos normales electromagnéticos de la partícula [1], por tanto, cada término en la serie [Ec. (1.51)] puede ser asociado a un término de la expansión multipolar [58]. Los armónicos esféricos vectoriales M y N corresponden a dos tipos de modos: el armónico $N_{e1n}^{(3)}$ se relaciona con modos del campo magnético sin componente radial (modos transversales magnéticos, también llamados de tipo eléctrico); mientras que $M_{o1n}^{(3)}$ se relaciona con los modos sin componente radial de campo eléctrico (modos transversales eléctricos o de tipo magnético). En la Fig. 1.10 se muestran los perfiles de intensidad de las primeras cuatro contribuciones multipolares, tanto de tipo eléctrico ($E_s \propto iN_{e1n}^{(3)}$) como magnético ($E_s \propto -M_{o1n}^{(3)}$), considerando sólo las componentes transversales. Las zonas en donde la intensidad del campo es baja (señaladas con color azul) corresponden a los puntos donde las componentes transversales del campo eléctrico son nulas y domina su componente radial, la cual no puede ser representada sobre la superficie de la esfera [1]. En la Fig. 1.10 también se incluyen las líneas de cada uno de los campos (flechas negras). Se observa que las líneas convergen (o divergen) a puntos sobre la esfera (regiones azules), similar a si estuvieran presentes cargas libres sobre la superficie de la esfera.



Fig. 1.10: Perfiles de intensidad de las componentes transversales de los primeros cuatro modos normales evaluados en la superficie de una esfera concéntrica a la partícula de radio a. La esfera imaginaria sobre la que se evalúa tiene un radio mayor al de la partícula. En el renglón superior se ubican las contribuciones eléctricas ($\mathbf{E}_s \propto i \mathbf{N}_{e1n}^{(3)}$), mientras que en el renglón inferior se encuentran las contribuciones magnéticas ($\mathbf{E}_s \propto -\mathbf{M}_{o1n}^{(3)}$). La escala de color corresponde a la magnitud del campo eléctrico esparcido || \mathbf{E}_s || evaluada en la superficie de la esfera imaginaria. Las flechas negras indican la orientación de las líneas de campo sobre la superficie de la esfera.

Los coeficientes de esparcimiento a_n y b_n también están asociados al tipo de respuesta que puede inducirse en la partícula. El coeficiente a_n se asocia a los momentos multipolares eléctricos mientras que b_n corresponde a momentos multipolares magnéticos [58]. Por consiguiente, el coeficiente a_1 es proporcional al momento dipolar eléctrico y b_1 al momento dipolar magnético, los momentos cuadrupolares eléctrico y magnético se asocian a a_2 y b_2 , respectivamente, y así sucesivamente [1]. La amplitud y fase de cada uno de los campos inducidos en la partícula se determinan a través de los coeficientes de Mie (ambos son cantidades complejas), por tanto, resulta útil escribirlos en términos de una amplitud y fase:

$$a_n = |a_n|e^{i\phi_{a_n}},\tag{1.56a}$$

$$b_n = |b_n| e^{i\phi_{b_n}}.\tag{1.56b}$$

En la serie que describe al campo eléctrico esparcido, Ec. (1.51), los coeficientes a_n y b_n actúan como pesos para los modos normales. Todas las contribuciones multipolares al campo esparcido están presentes e interfieren entre sí para generar un efecto total. Sin embargo, alguna contribución puede tener una magnitud mayor que el resto. Para que un multipolo domine sobre los demás, debe existir una resonancia en las Ecs. (1.53a) o (1.53b). Es decir, se debe cumplir que

$$m\psi_n(mx)\xi'_n(x) = \xi_n(x)\psi'_n(mx),$$
(1.57)

para el coeficiente a_n y que

$$\psi_n(mx)\xi'_n(x) = m\xi_n(x)\psi'_n(mx), \tag{1.58}$$

para b_n . Si bien, las condiciones para excitar a a_n y b_n son similares, no son iguales.

2.1.1 Secciones transversales de esparcimiento, extinción y absorción

La solución de Mie permite obtener expresiones analíticas para los campos EMs esparcidos por una partícula esférica de tamaño arbitrario y calcular la extinción de la luz debido al esparcidor esférico. La sección transversal de extinción, C_{ext} , puede entenderse como la energía extraída del haz de luz incidente, ya sea por esparcimiento o por absorción [58]. En cambio, la sección transversal de esparcimiento, C_{scat} , establece que la energía total esparcida en todas direcciones es igual a la energía de la onda incidente sobre el área C_{scat} . Asimismo, la sección transversal de absorción, C_{abs} , establece que la energía que se absorbe dentro de la partícula es igual a la energía que incide sobre el área C_{abs} . Las tres secciones transversales tienen cantidades tiene unidades de área [2].

Con el propósito de calcular las secciones transversales de extinción, absorción y esparcimiento de una partícula esférica de radio a, primero se determina la tasa neta de energía electromagnética, W_{abs} , que cruza la superficie A de una esfera imaginaria de radio r, concéntrica a la partícula, y cumple $r \ge a$:

$$W_{abs} = -\int_{A} \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{r} \, \mathrm{d}A \,, \tag{1.59}$$

donde S es el vector de Poynting asociado al campo electromagnético que cruza la esfera imaginaria. Si W_{abs} es positiva entonces la energía es absorbida por la esfera imaginaria (la matriz se considera un medio no absorbente). El vector de Poynting en el exterior de la esfera imaginaria tiene tres contribuciones asociadas a los campos EMs incidente (S_i), esparcido (S_{scat}) y extinguido (S_{ext}), por tanto

$$W_{abs} = -\int_{A} \left(\mathbf{S}_{i} + \mathbf{S}_{scat} + \mathbf{S}_{ext} \right) \cdot \mathbf{\hat{e}}_{r} \, \mathrm{d}A = W_{i} - W_{scat} + W_{ext}, \tag{1.60}$$

donde W_i es la tasa de energía incidente que atraviesa la superficie A, cuya contribución es cero, puesto que la matriz es no absorbente. La tasa a la cual la energía es esparcida a través de la superficie A es W_{scat} , de forma que la suma de las tasas de energía absorbida y esparcida es W_{ext} . Los vectores de Poynting asociados a los campos EMs incidente, de esparcimiento y extinción son [1]

$$\mathbf{S}_{i} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\mathbf{E}_{i} \times \mathbf{H}_{i}^{*}), \ \mathbf{S}_{scat} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\mathbf{E}_{scat} \times \mathbf{H}_{scat}^{*}), \ \mathbf{S}_{ext} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\mathbf{E}_{i} \times \mathbf{H}_{scat}^{*} + \mathbf{E}_{scat} \times \mathbf{H}_{i}^{*}), (1.61)$$

respectivamente. A partir de las Ecs. (1.61) se obtiene que [1]

$$W_{ext} = \int_{A} \mathbf{S}_{ext} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{r} \, \mathrm{d}A = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \left(E_{i\phi} H_{s\theta}^{*} - E_{i\theta} H_{s\phi}^{*} - E_{s\theta} H_{i\phi}^{*} + E_{s\phi} H_{i\theta}^{*} \right) r^{2} \sin(\theta) \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \right\},\tag{1.62a}$$

$$W_{scat} = \int_{A} \mathbf{S}_{scat} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{r} \, \mathrm{d}A = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \left(E_{s\theta} H_{s\phi}^{*} - E_{s\phi} H_{s\theta}^{*} \right) r^{2} \sin(\theta) \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \right\}.$$
(1.62b)

Las razones de energía W_{ext} y W_{scat} son independientes del estado de polarización de la luz incidente y, puesto que se considera que la luz está polarizada en $\hat{\mathbf{e}}_x$, las componentes angulares del campo EM incidente son [1]

$$E_{i\theta} = \frac{\cos(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(\psi_n \pi_n - i \psi'_n \tau_n \right), \quad H_{i\theta} = \frac{k}{\omega \mu} \tan(\phi) E_{i\theta}, \tag{1.63}$$

$$E_{i\phi} = \frac{\sin(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i\psi'_n \pi_n - \psi_n \tau_n \right), \quad H_{i\phi} = \frac{-k}{\omega\mu} \cot(\phi) E_{i\phi}.$$
 (1.64)

Por otro lado, las componentes del campo EM esparcido son [1]

$$E_{s\theta} = \frac{\cos(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i a_n \xi'_n \tau_n - b_n \xi_n \pi_n \right), \quad H_{s\theta} = \frac{k}{\omega \mu} \frac{\sin(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i b_n \xi'_n \tau_n - a_n \xi_n \pi_n \right), \quad (1.65)$$

$$E_{s\phi} = \frac{\sin(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(b_n \xi_n \tau_n - i a_n \xi'_n \pi_n \right), \quad H_{s\phi} = \frac{k}{\omega \mu} \frac{\cos(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i b_n \xi'_n \pi_n - a_n \xi_n \tau_n \right), \quad (1.66)$$

con las funciones angulares π_n y τ_n definidas como [1]

$$\pi_n = \frac{P_n^1(\cos\theta)}{\sin\theta} \quad \mathbf{y} \quad \tau_n = \frac{\mathrm{d}P_n^1(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta},\tag{1.67}$$

donde [1]

$$P_n^1 = -\frac{\mathrm{d}P_n}{\mathrm{d}\theta}.\tag{1.68}$$

 P_n corresponden a los polinomios de Legendre. Las funciones definidas en la Ec. (1.67) cumplen las siguientes relaciones de recurrencia

$$\pi_n = \frac{2n-1}{n-1} (\cos \theta) \pi_{n-1} - \frac{n}{n-1} \pi_{n-2} \quad \mathbf{y} \quad \tau_n = n(\cos \theta) \pi_n - (n+1) \pi_{n-1}, \tag{1.69}$$

con $\pi_0 = 0$ y $\pi_1 = 1$. Aunque las funciones π_n y τ_n no son ortogonales entre sí, satisfacen la siguiente relación [1]

$$\int_0^{\pi} (\pi_n \pi_m + \tau_n \tau_m) \sin \theta \, \mathrm{d}\theta = \delta_{nm} \frac{2n^2(n+1)^2}{2n+1},$$
(1.70)

donde δ_{nm} es la delta de Kronecker. Las funciones π_n y τ_n determinan la dependencia del campo esparcido con el ángulo θ [1]. En la Fig. 1.11 se muestran las funciones π_n y τ_n para los primeros cuatro valores de n. El número de lóbulos que presenta la función depende del valor de n, y al aumentar su valor los lóbulos se vuelven más angostos. Otra característica importante es que el signo de las funciones π_n y τ_n no siempre es positivo, con excepción de π_1 [1]. El signo de las funciones π_n y τ_n resulta importante porque cuando las diferentes contribuciones se suman en las expresiones de los campos esparcidos [Ec. (1.51)], los lóbulos pueden no sólo incrementar su magnitud, sino también disminuirla. Por tanto, la distribución angular de los campos EMs puede ser privilegiada en una dirección determinada. Las funciones en las Figs. 1.11(b, d, e, g) se graficaron considerando $\theta \in (0, 2\pi]$ con el propósito de visualizar la gráfica en todo el plano polar. Usando el rango original, $\theta \in [0, \pi]$, las funciones τ_2 , τ_4 , π_1 y π_3 sólo se muestran en el hemisferio superior del plano. Por otro lado, las funciones en las Figs. 1.11(a, c, f, h) también se muestran en todo el plano polar, al evaluar $\theta \in [0, \pi]$. Esta característica se debe a que si la función f, evaluada en θ_1 , es negativa, se representa dentro del plano polar como el punto radialmente opuesto a $-f(\theta_1)$.

Sustituyendo las expresiones de los campos EMs esparcidos por la partícula [Ecs. (1.65) y (1.66)] en la integral de W_{scat} [Ec. (1.62b)], se obtiene [1]

$$W_{scat} = \frac{\pi |E_0|^2}{k\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}\{g_n\} \left(|a_n|^2 + |b_n|^2 \right),$$
(1.71)



Fig. 1.11: Gráficas polares de las funciones (a)–(d) τ_n y (e)–(h) π_n , ambas evaluadas en θ y considerando n = 1, 2, 3, 4. Con el propósito de visualizar de mejor manera, para las gráficas (b, d, e, g), el valor del ángulo θ se eligió dentro del intervalo (0, 2π]. Para el resto de las figuras el ángulo θ se usó dentro de su intervalo usual ([0, π]). El color azul en las gráficas corresponde a los valores positivos de la función (π_n o τ_n) mientras el color rojo a los negativos.

donde $\operatorname{Re}\{z\}$ representa la parte real de z y g_n está dado por

$$g_n = (\chi_n^* \psi_n' - \psi^* \chi_n') - i (\psi_n^* \psi_n' - \chi^* \chi_n'), \qquad (1.72)$$

con la función de Riccati-Bessel $\chi_n = -i\rho y_n(\rho)$. Las funciones ψ_n y χ_n son reales cuando su argumento es real. Utilizando el *wronskiano* [1]

$$\chi_n \psi_n' - \psi_n \chi_n' = 1, \tag{1.73}$$

se obtiene que $\operatorname{Re}\{g_n\} = 1$.

La irradiancia del campo incidente está dada como:

$$I_0 = \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \hat{\mathbf{e}}_n = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \{ \mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_i^* \} \cdot \hat{\mathbf{e}}_n, \qquad (1.74)$$

donde $\hat{\mathbf{e}}_n$ corresponde a un vector radial y unitario que apunta hacia afuera de la superficie esférica que atraviesa el vector de Poynting S. Puesto que se considera que el campo EM incidente es armónico, la ley de Faraday-Lenz se reescribe como

$$\mathbf{k}_i \times \mathbf{E}_i = \omega \mu \mathbf{H}_i, \tag{1.75}$$

y sustituyendo la Ec. (1.75) en la Ec. (1.74) se obtiene que

$$I_{0} = \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \hat{\mathbf{e}}_{n} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ \frac{\mathbf{E}_{i} \times \mathbf{k}^{*} \times \mathbf{E}_{i}^{*}}{(\omega \mu)^{*}} \right\} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{n},$$

$$= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ \frac{(\mathbf{E}_{i} \cdot \mathbf{E}_{i}^{*}) \mathbf{k}^{*} - (\mathbf{E}_{i} \cdot \mathbf{k}^{*}) \mathbf{E}_{i}^{*}}{(\omega \mu)^{*}} \right\} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{n}.$$
 (1.76)

En ausencia de fuentes, una onda EM homogénea tiene un vector de onda k transversal al campo eléctrico $(\mathbf{E}_i \cdot \mathbf{k} = 0)$, de esta forma la irradiancia queda dada de la siguiente forma

$$I_0 = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\left\{\frac{E_i^2 k^*}{\omega \mu^*}\right\} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\left\{\frac{E_i^2 \omega \sqrt{(\epsilon \mu)^*}}{\omega \mu^*}\right\} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\left\{\sqrt{\frac{\epsilon^*}{\mu^*}}\right\} E_i^2.$$
(1.77)

Por otro lado, a partir de las expresiones para la tasa neta de energía esparcida [Ec. (1.71)] y la irradiancia [Ec. (1.77)], se calcula la sección transversal de esparcimiento [1]

$$C_{scat} = \frac{W_{scat}}{I_0} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(2n+1\right) \left(|a_n|^2 + |b_n|^2\right).$$
(1.78)

Análogamente se calcula la sección transversal de extinción [1]

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_0} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}(a_n + b_n).$$
(1.79)

A partir del teorema óptico se determina que la sección transversal de absorción está dada por [1]:

$$C_{abs} = C_{ext} - C_{scat}.$$
(1.80)

Dado que las secciones transversales de extinción, esparcimiento y absorción tienen unidades de área, al dividirlas por el área geométrica proyectada por la partícula esférica (πa^2) se obtienen las eficiencias (adimensionales) de extinción (Q_{ext}), esparcimiento (Q_{scat}) y absorción (Q_{abs}), respectivamente.

Las secciones transversales de esparcimiento y extinción también pueden ser calculadas a partir del vector de amplitud de esparcimiento \mathbf{X} [1]

$$C_{scat} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{|\mathbf{X}|^2}{k^2} d\theta d\phi, \qquad (1.81a)$$

$$C_{ext} = \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{Re}\{(\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_x)_{\theta=0}\},\tag{1.81b}$$

respectivamente. A partir de la Ec. (1.81a), es posible determinar la sección transversal de esparcimiento en dos direcciones de interés: para $\theta = 0$, que corresponde a la dirección paralela al vector de onda incidente (esparcimiento frontal), y $\theta = \pi$, que corresponde a la dirección antiparalela a la propagación del haz incidente (retroesparcimiento).

Con el fin de calcular la eficiencia de esparcimiento para $\theta = \pi$, se supone un esparcidor isótropo cuyo vector \mathbf{X}_{iso} no depende de la dirección y su magnitud es igual al esparcimiento sólo en la dirección $\theta = \pi$, es decir, $|\mathbf{X}_{iso}| = |\mathbf{X}(\pi)|$ [1]. Sustituyendo el valor de \mathbf{X} en la Ec. (1.81a) se calcula la sección transversal de esparcimiento asociada a la partícula en todas las direcciones. Es decir, la integral en la Ec. (1.81a) se calcula sobre todo el ángulo sólido [1]. Para propósitos de este trabajo se define la sección transversal de retroesparcimiento como

$$C_{scat}^{\text{back}} \equiv \frac{|\mathbf{X}(\pi)|^2}{k^2},\tag{1.82}$$

en donde se ha omitido intencionalmente el factor 4π proveniente de la integral de la Ec. (1.81a).

La matriz de esparcimiento, para el caso de un esparcidor esférico, tiene la siguiente forma [1]:

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel s} \\ E_{\perp s} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & 0 \\ 0 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel i} \\ E_{\perp i} \end{pmatrix},$$
(1.83)

con los coeficientes de amplitud S_1 y S_2 dados por [1]

$$S_1(\cos\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[a_n \pi_n(\cos\theta) + b_n \tau_n(\cos\theta) \right],$$
 (1.84a)

$$S_2(\cos\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[a_n \tau_n(\cos\theta) + b_n \pi_n(\cos\theta) \right].$$
 (1.84b)

CAPÍTULO 1 • TEORÍA

A partir de la expresión para el vector de amplitud de esparcimiento, Ec. (1.35), y las Ecs. (1.84), es posible calcular el valor de $|\mathbf{X}(\pi)|$:

$$|\mathbf{X}(\pi)|^{2} = |S_{2}(\cos \pi) \cos \phi \, \hat{\mathbf{e}}_{\theta} - S_{1}(\cos \pi) \sin \phi \, \hat{\mathbf{e}}_{\phi}|^{2} ,$$

= $|S_{2}(\cos \pi) \cos \phi|^{2} + |S_{1}(\cos \pi) \sin \phi|^{2} .$ (1.85)

Por otra parte, dado que las funciones $\pi_n(\cos\theta)$ y $\tau_n(\cos\theta)$ cumplen las siguientes relaciones [1]

$$\pi_n(-\cos\theta) = (-1)^{n-1} \pi_n(\cos\theta) \quad \mathbf{y} \quad \tau_n(-\cos\theta) = (-1)^n \tau_n(\cos\theta), \tag{1.86}$$

se simplifican las expresiones para S_1 y S_2 evaluadas en $\theta = \pi$:

$$S_{1}(\cos \pi) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[a_{n}(-1)^{n-1}\pi_{n}(1) + b_{n}(-1)^{n}\tau_{n}(1) \right],$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \frac{n(n+1)}{2} (-1)^{n} (b_{n} - a_{n}),$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{2} (-1)^{n} (b_{n} - a_{n}),$$

$$S_{2}(\cos \pi) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[a_{n}(-1)^{n}\tau_{n}(1) + b_{n}(-1)^{n-1}\pi_{n}(1) \right],$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \frac{n(n+1)}{2} (-1)^{n} (a_{n} - b_{n}),$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{2} (-1)^{n} (a_{n} - b_{n}),$$
(1.88)
$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{2} (-1)^{n} (a_{n} - b_{n}),$$
Era que [1]

en donde se considera que [1]

$$\pi_n(1) = \tau_n(1) = \frac{n(n+1)}{2}.$$
(1.89)

De las Ecs. (1.87) y (1.88) se concluye que $S_1(\cos \pi) = -S_2(\cos \pi)$. Sustituyendo los resultados de las Ecs. (1.87) y (1.88) en la Ec. (1.85) se obtiene que

$$|\mathbf{X}(\pi)|^2 = |S_1(\cos \pi)|^2(\cos^2 \phi + \sin^2 \phi) = \left|\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{2} (-1)^n (a_n - b_n)\right|^2.$$
 (1.90)

Recordando que la sección transversal de esparcimiento es igual a W_{scat}/I_0 , y haciendo uso de las Ecs. (1.82) y (1.90), se tiene que la eficiencia de esparcimiento en la dirección $-\mathbf{k}_i$, es decir, cuando $\theta = \pi$, está dada por

$$Q_{scat}^{\text{back}} = \frac{C_{scat}^{\text{back}}}{\pi a^2} = \frac{|\mathbf{X}(\pi)|^2}{\pi a^2 k^2} = \frac{1}{4\pi x^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (-1)^n (a_n - b_n) \right|^2,$$
(1.91)

donde *a* corresponde al radio de la partícula. A través de un procedimiento análogo se determina que la expresión para la eficiencia de esparcimiento en la dirección paralela a \mathbf{k}_i ($\theta = 0$) es

$$Q_{scat}^{\text{forw}} = \frac{1}{4\pi x^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left(a_n + b_n \right) \right|^2.$$
(1.92)

Cabe resaltar que las expresiones obtenidas para las eficiencias de retroesparcimiento [Ec. (1.91)] y de esparcimiento frontal [Ec. (1.92)] difieren de las expresiones usuales [19, 59] debido al factor a $(4\pi)^{-1}$ omitido. Sin embargo, para los fines de este trabajo no representa mayor inconveniente.

2.2 Respuesta óptica de partículas esféricas individuales dieléctricas y con respuesta metálica

Como se revisó en la sección anterior, las resonancias de Mie—cuya naturaleza puede ser eléctrica o magnética—dependen de las propiedades ópticas del material y del tamaño de la partícula [19]. Un ejemplo de la dependencia de las resonancias con las propiedades ópticas del material se presentan en esparcidores dieléctricos y con respuesta metálica. Dentro del rango visible, las partículas metálicas presentan resonancias de tipo eléctrico [7], mientras que las partículas dieléctricas pueden presentar resonancias no sólo de tipo eléctrico sino también magnético [17, 19]. La respuesta magnética inducida en la partícula dieléctrica puede ser comparable o mayor a la respuesta eléctrica [60]. Para ilustrar lo anterior, se calculó la eficiencia de extinción para una partícula con respuesta metálica y para una dieléctrica, ambas del mismo radio arbitrario (a = 60 nm).

De manera representativa, se eligió el modelo de Drude [50] para representar la respuesta plasmónica, eligiendo los parámetros correspondientes al aluminio. Por tanto, la función dieléctrica que describe la respuesta electromagnética de la partícula está dada por

$$\epsilon_p(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)},\tag{1.93}$$

con ω_p la frecuencia de plasma y γ el factor de amortiguamiento. La Ec. (1.93) modela a la función dieléctrica de un material considerando sólo el efecto de los electrones libres. Los parámetros ω_p y γ están dados por [50]

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m_e \epsilon_0}}, \qquad \gamma = \frac{v_F}{l}, \tag{1.94}$$

respectivamente; la frecuencia de plasma se expresa en términos del número de electrones por unidad de volumen (n), la carga y la masa efectiva de los electrones libres ($e \ y \ m_e$, respectivamente), mientras que γ se asocia con la velocidad de Fermi (v_F) y el camino libre medio de los electrones dentro del material (l). Para el caso de aluminio se utiliza que $\hbar \omega_p = 13.142 \text{ eV} \ y \ \hbar \gamma = 0.197 \text{ eV}$ [61]. Como ejemplo de una partícula dieléctrica, se consideró una función dieléctrica sólo con parte real, de tal forma que se desprecian las pérdidas dentro del material. Se escogió que $\epsilon_p(\omega) = 16$, el cual asemeja a la parte real de la función dieléctrica del germanio dentro del rango de frecuencias del visible e infrarrojo, el cual presenta también pérdidas considerables dentro del mismo rango [60].

La eficiencia de extinción en el caso de la partícula de aluminio, con respuesta dada por el modelo de Drude, se presenta en la Fig. 1.12(a). Se realizó la descomposición multipolar con el propósito de identificar a los multipolos con mayor contribución al espectro de Q_{ext} . Dentro del rango de longitudes de onda estudiado (90–500 nm), se encontraron resonancias asociadas a los coeficientes a_1 (línea roja), a_2 (línea verde), a_3 (línea morada), a_4 (línea anaranjada) y b_1 (línea azul). El coeficiente a_1 , asociado al dipolo eléctrico (DE), es el de mayor magnitud respecto al resto de multipolos identificados. Es importante hacer notar que la magnitud de la contribución de cada coeficiente decae al aumentar el orden del multipolo, es decir, la contribución de a_2 es mayor a la de a_3 y a_4 , siendo la contribución de a_4 la menor de todas las mostradas. Otra característica es que cada una de las resonancias tiene su propia frecuencia (o longitud de onda) de resonancia. La resonancia correspondiente a a_1 está localizada alrededor de 310 nm, mientras que para a_2 se encuentra alrededor de $\lambda = 205$ nm, a_3 y a_4 se centran alrededor de $\lambda = 170$ nm y $\lambda = 155$ nm, respectivamente. Por tanto, para excitar resonancias de multipolos de orden mayor al DE, son necesarias energías mayores. Cabe señalar que en esta partícula plasmónica también existen resonancias magnéticas (se muestra el dipolo magnético, DM, localizado alrededor de $\lambda = 100$ nm). Sin embargo, su magnitud es muy pequeña comparada al resto de las resonancias presentes. En la Fig. 1.12(a) su contribución está multiplicada por un factor de 5 con el fin de lograr una mejor
visualización. En conclusión, en un material plasmónico la resonancia más importante proviene del DE y le siguen resonancias de multipolos eléctricos de orden mayor. Aunque es posible obtener una respuesta magnética, se requiere de energías altas y su contribución no es significativa.



Fig. 1.12: Eficiencia de extinción para a una partícula esférica de radio a = 60 nm embebida en aire. Se considera que la partícula se compone de (**a**) un material con respuesta metálica con función dieléctrica dada por el modelo de Drude ($\hbar\omega_p = 13.142 \text{ eV}, \ \hbar\gamma = 0.197 \text{ eV}$), y de (**b**) un material dieléctrico con $\epsilon_p = 16$. En ambos cálculos la eficiencia de extinción total corresponde a la línea negra; también se grafican las contribuciones individuales de los coeficientes a_1 (línea roja), a_2 (línea verde), a_3 (línea morada), a_4 (línea cian), b_1 (línea azul) y b_2 (línea magenta).

En el caso de una partícula dieléctrica, su eficiencia de extinción se presenta en la Fig. 1.12(b). Para esta partícula, dentro del rango 250–500 nm, se muestran tres resonancias provenientes de los coeficientes a_1 (línea roja), b_1 (línea azul) y b_2 (curva magenta). En contraste con lo obtenido para la partícula plasmónica, la resonancia que se excita con la energía incidente menor está asociada al DM, localizada alrededor de $\lambda = 415$ nm. Después aparece la resonancia del DE en $\lambda \approx 308nm$ y del cuadrupolo magnético (CM) centrada en $\lambda \approx 287$ nm. En contraste al caso plasmónico, es posible excitar una respuesta magnética dentro del rango visible cuya magnitud es mayor a la DE. Cabe resaltar que la resonancia del DM en la partícula dieléctrica es aproximadamente dos veces mayor a la resonancia del DE en la partícula de aluminio, ver Fig. 1.12.

El comportamiento de las resonancias en una partícula plasmónica o dieléctrica puede entenderse a través de los electrones dentro de cada material. En el caso de un material plasmónico, existen electrones libres que son capaces de moverse bajo la influencia de un campo eléctrico externo. Cuando la frecuencia de la luz incidente iguala a la de las oscilaciones de los electrones libres dentro de la esfera, la resonancia plasmónica aparece y se produce un campo eléctrico intenso en la vecindad de la partícula. Las oscilaciones están acompañadas por pérdidas óhmicas significativas que causan que la partícula se caliente [62]. En la Fig. 1.13(a) se ilustra el campo eléctrico asociado al DE inducido en una partícula plasmónica. Al interactuar con un campo eléctrico incidente la partícula se polariza, dejando en un lado las cargas positivas (círculos rojos) y en el opuesto a las negativas (círculos azules). Por tanto, aparece un campo eléctrico correspondiente al DE. En el diagrama de la parte superior de la Fig. 1.13(a) el color rojo indica la intensidad del campo eléctrico, mientras que en el diagrama de la zona inferior se indican las líneas de campo (líneas negras).

En contraste a las partículas metálicas, las partículas dieléctricas tienen resonancias que se originan de las corrientes de desplazamiento inducidas [60]. Dentro de la partícula se encuentran electrones ligados que no pueden moverse libremente, pero sí presentan ligeros desplazamientos. Las corrientes de desplazamiento se originan a partir de la polarización de los átomos o moléculas en los materiales dieléctricos debida a la presencia de un campo eléctrico externo [62]. La resonancia del DM aparece

cuando la longitud de onda dentro de la partícula se aproxima al diámetro, es decir, $\lambda_0/n_p \approx 2a$. Por lo tanto, dentro de la partícula, la onda EM completa un ciclo de oscilación, ver Fig. 1.13(b), de tal forma que la polarización de la onda en una mitad de la esfera es opuesta a la polarización en la otra mitad [18]. En el diagrama superior de la Fig. 1.13(b) se muestra la polarización de los átomos dentro del material, que da lugar a una corriente de desplazamiento, y en el lado derecho se muestra la polarización del campo eléctrico radiado por la partícula.

De acuerdo a la condición $\lambda_0/n_p \approx 2a$, es posible elegir el tamaño e índice de refracción de la partícula para que la resonancia DM se localice dentro del rango visible o infrarrojo. En el caso de considerar nanopartículas, la resonancia del DM aparece en longitudes de onda dentro del rango visible si se usan materiales con índice de refracción alto. Algunos materiales que muestran resonancias magnéticas dentro del rango visible e infrarrojo cercano son los semiconductores como Si, Ge y AlGaAs. En el infrarrojo medio, se tienen a los semiconductores como Te, PbTe y SiC [60, 63]. Vale la pena señalar que la mayoría de los materiales dieléctricos que se emplean en la nanofotónica cuentan con una parte imaginaria del índice de refracción baja en comparación a la parte real.

A partir de la solución de Mie es posible mostrar que partículas esféricas compuestas por dieléctricos con alto índice de refracción son capaces de producir una respuesta magnética considerable. Siguiendo la idea presentada en [17], se calcula la sección transversal de extinción de una partícula esférica aislada embebida en aire ($n_m = 1$), que se grafica en la Fig. 1.14 en función del índice relativo $m = n_p$ y del parámetro y = mx, con x el parámetro de tamaño. Puesto que se supone que el índice de refracción de la partícula es real, la absorción es nula. Además, la sección transversal se normalizó utilizando el máximo valor. El código de colores representa la contribución de los coeficientes de Mie: el color rojo se asocia al coeficiente a_1 , el verde a b_1 y el azul representa a los coeficientes de orden mayor (tanto eléctricos como magnéticos). Las zonas donde domina el color rojo o verde indican que la contribución de mayor magnitud proviene de alguno de los dipolos. Para y < 2, la respuesta general de la partícula se atribuye al DE, sin embargo, su magnitud es aproximadamente diez veces menor a la magnitud de la resonancia del DM, la cual se localiza alrededor de y = 3.5. Cabe destacar que dentro de los rangos de m y y estudiados,



Fig. 1.13: (a) Partícula plasmónica sobre la que se induce una respuesta dipolar eléctrica. Las líneas del campo eléctrico E radiado se denotan con las líneas negras. La respuesta se asocia con la distribución de cargas dentro del material debida al campo incidente. (b) Partícula dieléctrica donde se induce una respuesta dipolar magnética. El campo eléctrico radiado E tiene líneas de campo indicadas con líneas negras. En este caso, las cargas se distribuyen de tal forma que se crea una corriente de desplazamiento circular. Se cumple la condición $\lambda_0/n_p \approx 2a$ y se ilustra la polarización del campo incidente dentro de la onda E_i . En ambos diagramas las cargas positivas están representadas con círculos rojos, mientras que las negativas se asocian con círculos azules.

la resonancia asociada al DM presenta la mayor magnitud respecto al resto de las resonancias. En la Fig. 1.14(b) se observa que la magnitud de la resonancia se incrementa conforme crece el valor de m. Es importante señalar que la resonancia del DM tiene una magnitud mayor a ~ 0.5 desde $m \approx 2$. Lo cual es relevante, ya que muestra que es posible utilizar un material con índice de refracción menor al de silicio dentro del rango visible (~ 3.5) para obtener una resonancia del DM predominante en la respuesta óptica de la partícula. Con esto se amplía la gama de materiales que puede investigarse. Otra característica que puede observarse en la Fig. 1.14 es que hay resonancias de órdenes superiores que pueden excitarse al variar el valor de y y mantener constante m.



Fig. 1.14: Sección transversal de extinción para una partícula esférica embebida en aire en función del parámetro y = mx y del índice de refracción relativo $m = n_m$. El cálculo se realizó hasta n = 3 y se normalizó usando el valor máximo alcanzado. El código de color se asocia al coeficiente de mayor contribución: el color rojo corresponde a a_1 , el verde a b_1 y el azul a coeficientes de orden mayor.

El potencial de las partículas dieléctricas se ha demostrado tanto teóricamente como experimental. En el año 2011 [17] se describió la respuesta óptica de nanopartículas de silicio en el visible e infrarrojo de forma teórica. En 2012 dos grupos de investigación realizaron experimentos independientes que probaron la presencia de resonancias magnéticas. En ambos casos se utilizaron nanopartículas de silicio para observar la resonancia del DM dentro del rango visible [18, 63].

3 EFECTOS TIPO KERKER

La coexistencia de resonancias magnéticas y eléctricas da lugar efectos de interferencia que hacen posible la manipulación de la direccionalidad de la luz esparcida [60, 62]. Una partícula sobre la cual se induce sólo una respuesta dipolar eléctrica produce un patrón de radiación simétrico. Considerando interferencias entre diferentes resonancias, el patrón de radiación puede adquirir una forma más compleja y es posible obtener un patrón asimétrico [64].

Un efecto debido a la interferencia de resonancias multipolares son las condiciones de Kerker [19]. Se trata de un efecto de interferencia (destructiva o constructiva) en una dirección particular del esparcimiento [65]. En 1983 M. Kerker, D. S. Wang y C. L. Giles [31] realizaron un trabajo teórico donde se demostró, por primera vez, que una partícula esférica, con dimensiones sublongitud de onda y con propiedades tanto eléctricas como magnéticas (inmersa en el vacío), puede producir retroesparcimiento nulo al ser iluminada por una onda EM plana si el material del que está compuesta cumple $\epsilon_p = \mu_p$, donde ϵ_p es la permitividad eléctrica de la partícula y μ_p su permeabilidad magnética. Considerando que el índice de refracción de la partícula puede escribirse como $\sqrt{\epsilon_p \mu_p}$ y de la condición $\epsilon_p = \mu_p$, los coeficientes de esparcimiento a_n y b_n se reducen a

$$a_n = \frac{\mu_p \psi_n(\mu_p x) \psi'_n(x) - \mu_p \psi_n(x) \psi'_n(\mu_p x)}{m \psi_n(\mu_p x) \xi'_n(x) - \mu_p \xi_n(x) \psi'_n(\mu_p x)} = b_n,$$
(1.95)

cuando la esfera está inmersa en el vacío. Asimismo, Kerker *et al.* demostraron que si $\epsilon_p = (4 - 1)^{-1}$ $(\mu_p)/(2\mu_p+1)$, la partícula no radia en la dirección frontal, por lo que $a_1 = -b_1$. Ambas situaciones descritas por Kerker se nombraron en su honor de la siguiente forma: el caso del retroesparcimiento nulo se conoce como primera condición de Kerker, mientras que para el esparcimiento frontal nulo se conoce como segunda condición de Kerker [19]. Una característica importante de las condiciones de Kerker es que se pueden cumplir a diferentes longitudes de onda para una misma partícula [62]. El trabajo de Kerker no obtuvo mucha atención cuando fue publicado, pues no existe una amplia cantidad de materiales con respuesta magnética intrínseca dentro del rango de frecuencias del rango visible [34]. Sin embargo, el concepto de magnetismo inducido [17, 66] permitió que décadas más tarde surgiera un mayor interés en el trabajo original de Kerker. En épocas recientes se han logrado realizar demostraciones experimentales del esparcimiento direccional debido a las condiciones de Kerker usando nanopartículas. Por mencionar algunos ejemplos, se tienen los experimentos realizados con nanopartículas de silicio [32] y arseniuro de galio [33]. Por tanto, el estudio de las condiciones de Kerker se ha extendido más allá de partículas magnéticas; sólo se requiere que la partícula sea capaz de radiar campos EMs provenientes de dipolos inducidos (eléctrico y magnético) [19]. Este hecho puede comprobarse al escribir la sección transversal de esparcimiento diferencial en términos de las polarizabilidades dinámicas eléctrica (α_E) y magnética (α_M) [67]:

$$\frac{|\mathbf{X}|^2}{k^2} = \frac{k^4}{(4\pi)^2} \left[\left(|\alpha_E|^2 + |\alpha_M|^2 \right) \frac{1 + \cos^2\theta}{2} + 2\operatorname{Re}\left(\alpha_E \alpha_M^* \right) \cos\theta \right].$$
(1.96)

Cabe destacar que, para esferas dentro del límite de partícula pequeña, la relación de las polarizabilidades α_E y α_M con las polarizabilidades estáticas $\alpha_E^{(0)}$ y $\alpha_M^{(0)}$ es [67]

$$\alpha_E = \frac{\alpha_E^{(0)}}{1 - i\frac{k^3}{6\pi}\alpha_E^{(0)}} \quad \text{y} \quad \alpha_M = \frac{\alpha_M^{(0)}}{1 - i\frac{k^3}{6\pi}\alpha_M^{(0)}}, \tag{1.97}$$

respectivamente. Las expresiones para las polarizabilidades presentadas en la Ec. (1.97) corresponden a las llamadas polarizabilidades con correcciones radiativas [68]. En la Ec. (1.96) se ha considerado que la respuesta de la partícula sólo tiene contribuciones de los dipolos eléctrico y magnético [69]. Para el caso del esparcimiento frontal ($\theta = 0$) y el retroesparcimiento ($\theta = \pi$), la expresión de la Ec. (1.96) se reduce a [67]

$$\left(\frac{|\mathbf{X}|^2}{k^2}\right)_{\theta=0,\,\pi} = \frac{k^4}{(4\pi)^2} \left|\alpha_E \pm \alpha_M\right|^2,\tag{1.98}$$

en donde el signo positivo corresponde a $\theta = 0$ y el negativo a $\theta = \pi$, y de donde se observa que el retroesparcimiento se anula si

$$\alpha_E - \alpha_M = 0. \tag{1.99}$$

La relación obtenida en la Ec. (1.99) es equivalente a la condición derivada por Kerker ($\epsilon_p = \mu_p$) para eliminar el retroesparcimiento de partículas magnéticas [69]. Dado que la Ec. (1.99) sólo impone restricciones en las polarizabilidades y no en la permitividad o permeabilidad del material, las condiciones de Kerker pueden obtenerse con partículas que muestren magnetismo inducido [19].

Es importante hacer notar que, si bien es posible lograr que el retroesparcimiento sea exactamente cero, el esparcimiento frontal sólo puede ser minimizado. La razón se encuentra en el teorema óptico:

considerando que la absorción es nula, se tiene que $C_{ext} = C_{scat}$ [2]. La sección transversal de extinción está relacionada con el vector de amplitud de esparcimiento en la dirección frontal [Ec. (1.81b)]. Por otro lado, el campo eléctrico esparcido por la partícula es proporcional a X [Ec. (1.30)] en la región de campo lejano. Cuando la magnitud del vector de amplitud de esparcimiento en la dirección frontal es cero, la sección transversal de extinción total también lo es [19, 70]. Por tanto, a través del teorema óptico, se concluye que la sección transversal de esparcimiento total es exactamente cero a pesar de que en el resto de las direcciones no es nula, resultando en una contradicción. En un trabajo realizado por Alù y Engheta [71] se propuso una corrección para la expresión de la sección transversal de extinción, con la cual mostraron que si bien el esparcimiento frontal no es exactamente cero, muestra un mínimo respecto a los demás ángulos [72]. Es posible mostrar que para la eficiencia de esparcimiento diferencial se cumple $[|X(\theta = 0)|^2/\pi a^2 k^2] \sim (ka)^{10}$ [19]. La segunda condición de Kerker fue originalmente derivada para esparcidores dentro del límite de partícula pequeña, es decir, que cumplen $ka \ll 1$, por tanto, si el esparcimiento frontal es proporcional a $(ka)^{10}$, se aproximará a cero para este caso, tal como predijo Kerker en su publicación original [73].

Las dos condiciones de Kerker imponen relaciones entre los coeficientes de esparcimiento magnéticos y eléctricos. Para anular el retroesparcimiento se necesita que $a_1 = b_1$, mientras que para eliminar el esparcimiento frontal es necesario que $a_1 = -b_1$. La interferencia (destructiva en una dirección y constructiva en la opuesta) entre los dipolos inducidos se da debido a la orientación del campo eléctrico radiado por la partícula. Los patrones de radiación correspondientes a los dipolos eléctrico y magnético tienen una forma similar [ver Figs. 1.15(a) y 1.15(b), respectivamente]. Sin embargo, las orientaciones de los campos magnético y eléctrico cambian para cada caso. Considerando dos puntos en el patrón de radiación del dipolo eléctrico [puntos A y B en la Figs. 1.15], en donde los vectores de onda asociados a cada punto apuntan en direcciones opuestas, se observa que la orientación del campo eléctrico en el punto A es paralela al campo eléctrico en B. Al revisar lo que sucede con el campo E asociado al dipolo magnético [Fig. 1.15(b)], la orientación del campo eléctrico asociado al punto A es antiparalela al campo eléctrico en el punto **B**. Cuando ambos dipolos oscilan en fase y se suman entre ellos, el patrón de radiación resultante es asimétrico [Fig. 1.15(c)], puesto que en el punto A el campo eléctrico de ambos dipolos están orientados hacia la misma dirección, interfiriendo constructivamente, mientras que en el punto **B**, el campo eléctrico para cada dipolo está orientado de forma antiparalela entre sí y su interferencia es destructiva [62].

Con el propósito de analizar con mayor detalle las condiciones de Kerker, se asumirá que sólo los dipolos eléctrico y magnético son excitados en una partícula esférica. Primero se estudiará lo que sucede con el campo eléctrico esparcido por la partícula, centrada en el origen, sobre la que incide una onda monocromática cuyo vector eléctrico está polarizado linealmente, paralelo al eje $\hat{\mathbf{e}}_x$, y la onda se propaga con un vector de onda \mathbf{k}_i paralelo al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$. Los dipolos eléctrico y magnético inducidos en la esfera están dados por [17]

$$\mathbf{p} = \alpha_E \epsilon_0 E_0 \hat{\mathbf{e}}_x, \tag{1.100a}$$

$$\mathbf{m} = \alpha_M H_0 \mathbf{\hat{e}}_y, \tag{1.100b}$$

respectivamente. En las Ecs. (1.100) se utilizaron las polarizabilidades dinámicas eléctrica α_E y magnética α_M , dadas por las expresiones en la Ec. (1.97). Los dipolos inducidos generan un campo eléctrico en la región de campo lejano, dado por [74]:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_p + \mathbf{E}_m = \frac{k_i^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\mathbf{\hat{e}}_r \times (\mathbf{p} \times \mathbf{\hat{e}}_r) + \frac{1}{c} \mathbf{m} \times \mathbf{\hat{e}}_r \right],$$
(1.101)

donde \mathbf{E}_p representa la contribución del dipolo eléctrico y \mathbf{E}_m la del dipolo magnético. La velocidad de la luz se denota con $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$ En coordenadas esféricas, los momentos dipolares eléctricos, p, y



Fig. 1.15: Patrones de radiación de un dipolo (**a**) eléctrico y (**b**) uno magnético. Las flechas rojas representan la orientación del campo eléctrico **E** en los puntos **A** y **B**, mientras que las flechas azules representan al campo **H** en dichos puntos. El vector de onda **k** se denota por flechas negras. En (**a**) la flecha verde corresponde al momento dipolar eléctrico **p**, mientras que en (**b**) la flecha magenta indica al momento dipolar magnético **m**. La interacción de ambos dipolos se muestra en (**c**), donde el vector de onda incidente \mathbf{k}_i se denota con la flecha anaranjada. En el punto **A** la interferencia es constructiva mientras que en **B** es destructiva, por ello, en dicho punto el patrón de radiación es nulo. La línea punteada indica el eje sobre el cual se ubican los puntos **A** y **B**.

magnético, m, se escriben como

$$\mathbf{p} = p_0 \mathbf{\hat{e}}_x = p_0 (\sin\theta\cos\phi\,\mathbf{\hat{e}}_r + \cos\theta\cos\phi\,\mathbf{\hat{e}}_\theta - \sin\phi\,\mathbf{\hat{e}}_\phi), \tag{1.102a}$$

$$\mathbf{m} = m_0 \hat{\mathbf{e}}_y = m_0 (\sin\theta \sin\phi \,\hat{\mathbf{e}}_r + \cos\theta \sin\phi \,\hat{\mathbf{e}}_\theta + \cos\phi \,\hat{\mathbf{e}}_\phi). \tag{1.102b}$$

Por tanto, al sustituir las Ecs. (1.102) en la Ec. (1.101), se obtiene la siguiente expresión para el campo eléctrico

$$\mathbf{E} = \frac{k_i^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\left(\frac{m_0}{c} + p_0 \cos\theta \right) \cos\phi \,\hat{\mathbf{e}}_{\theta} - \left(p_0 + \frac{m_0}{c} \cos\theta \right) \sin\phi \,\hat{\mathbf{e}}_{\phi} \right]. \tag{1.103}$$

Las polarizabilidades eléctrica y magnética se relacionan con los coeficientes a_1 y b_1 de la siguiente manera [17]

$$\alpha_E = i \frac{6\pi}{k_i^3} a_1 \quad \text{y} \quad \alpha_M = i \frac{6\pi}{k_i^3} b_1, \tag{1.104}$$

por tanto, sustituyendo los valores de las polarizabilidades [Ec. (1.104)] en las Ecs. (1.100), se obtiene que

$$p_0 = i \frac{6\pi}{k_i^3} a_1 \epsilon_0 E_i \quad \mathbf{y} \quad m_0 = i \frac{6\pi}{k_i^3} b_1 H_i.$$
(1.105)

Al sustituir las Ecs. (1.105) en la expresión del campo eléctrico, Ec. (1.103), se obtiene

$$\mathbf{E} = \frac{i3}{2\epsilon_0 k_i} \left[\left(\frac{b_1 H_i}{c} + a_1 \epsilon_0 E_i \cos \theta \right) \cos \phi \, \hat{\mathbf{e}}_{\theta} - \left(a_1 \epsilon_0 E_i + \frac{b_1 H_i}{c} \cos \theta \right) \sin \phi \, \hat{\mathbf{e}}_{\phi} \right], \\ = \frac{i3}{2\epsilon_0 k_i} \left[(b_1 \epsilon_0 E_i + a_1 \epsilon_0 E_i \cos \theta) \cos \phi \, \hat{\mathbf{e}}_{\theta} - (a_1 \epsilon_0 E_i + b_1 \epsilon_0 E_i \cos \theta) \sin \phi \, \hat{\mathbf{e}}_{\phi} \right],$$

$$= \frac{3i}{2k_i} E_i \left[(b_1 + a_1 \cos \theta) \cos \phi \, \hat{\mathbf{e}}_{\theta} - (a_1 + b_1 \cos \theta) \sin \phi \, \hat{\mathbf{e}}_{\phi} \right],$$
(1.106)

en donde se utilizó la relación $E_i = H_i \sqrt{\epsilon_0/\mu_0}$. En la Ec. (1.106) se distinguen dos casos de interés. El primero es $\phi = 0$, es decir, el plano que contiene al dipolo eléctrico [ver Fig. 1.16(a)], sobre el cual la



Fig. 1.16: (a) Esparcidor esférico centrado en el origen sobre el que incide una onda plana propagándose paralela al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$ (el vector de onda \mathbf{k}_i se indica con una flecha negra). La onda incidente tiene asociado un campo eléctrico polarizado en $\hat{\mathbf{e}}_x$ (denotado por la flecha roja). Los momentos dipolares inducidos se señalan con una flecha verde para el dipolo eléctrico y una flecha magenta para el dipolo magnético. Los planos $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$ se encuentran de color verde y magenta, respectivamente. (b) Gráficas de las funciones τ (curva roja) y ν (curva azul). La zona gris señala los valores del ángulo θ que se consideran dentro del hemisferio frontal del plano polar (la dirección está definida a partir del vector de onda incidente \mathbf{k}_i).

componente azimutal del campo eléctrico esparcido por la partícula se anula. El campo eléctrico radiado por la esfera desaparece completamente si se cumple la relación

$$b_1 + a_1 \cos \theta = 0. \tag{1.107}$$

Por otra parte, cuando $\phi = \pi/2$ [plano que contiene al dipolo magnético, ver Fig. 1.16(a)], la componente polar del campo se anula y, sobre dicho plano, E, se elimina cuando

$$a_1 + b_1 \cos \theta = 0. \tag{1.108}$$

En consecuencia, el campo eléctrico inducido puede ser anulado en alguno de los planos que contienen a los dipolos inducidos para cualquier ángulo polar, siempre que se satisfaga la Ec. (1.107) o la Ec. (1.108). Cabe destacar que cuando el dipolo magnético domina respecto al dipolo eléctrico, el campo eléctrico se anula en el plano que contiene al momento dipolar magnético. En caso contrario, si la magnitud del dipolo eléctrico es mayor que la del dipolo magnético, el campo eléctrico se anula en el plano que contiene al momento, el campo eléctrico se anula en el plano que contiene al momento dipolar magnético. En caso contrario, si la magnitud del dipolo eléctrico es mayor que la del dipolo magnético, el campo eléctrico se anula en el plano que contiene al momento dipolar eléctrico [19]. Por tanto, el campo esparcido no puede ser anulado para el mismo ángulo θ en ambos planos, con excepción de los casos $\theta = \pi$ y $\theta = 0$ [19], que corresponden a la primera y segunda condición de Kerker, respectivamente.

Las condiciones de Kerker imponen restricciones tanto en la magnitud como en la fase de los coeficientes de esparcimiento. Para determinar las condiciones que deben cumplir las fases dipolares con el fin de suprimir al esparcimiento frontal o el retroesparcimiento, se estudia la eficiencia diferencial de esparcimiento para un esparcidor esférico, dada por [19]

$$dQ(\theta,\phi) = \frac{|\mathbf{X}|^2}{k_i^2 \pi a^2} = \frac{1}{k_i^2 \pi a^2} \left(|S_2|^2 \cos^2 \phi + |S_1|^2 \sin^2 \phi \right),$$
(1.109)

considerando que las funciones S_1 [Ec. (1.84a)] y S_2 [Ec. (1.84b)] sólo tienen contribuciones dipolares, es decir, n = 1, se obtiene que

$$|S_{1}|^{2} = S_{1}S_{1}^{*} = \frac{9}{4} (a_{1} + b_{1}\cos\theta) (a_{1}^{*} + b_{1}^{*}\cos\theta),$$

$$= \frac{9}{4} \left[|a_{1}|^{2} + |b_{1}|^{2}\cos^{2}\theta + \left(|a_{1}||b_{1}|e^{i(\phi_{a_{1}} - \phi_{b_{1}})} + |a_{1}||b_{1}|e^{-i(\phi_{a_{1}} - \phi_{b_{1}})} \right)\cos\theta \right], \quad (1.110)$$

$$= \frac{9}{4} \left[|a_{1}|^{2} + |b_{1}|^{2}\cos^{2}\theta + 2|a_{1}||b_{1}|\cos\theta\cos(|\phi_{a_{1}} - \phi_{b_{1}}|) \right] = \frac{9}{4}S_{1},$$

y análogamente, para $|S_2|$

0

$$|S_2|^2 = \frac{9}{4} \left[|b_1|^2 + |a_1|^2 \cos^2 \theta + 2|a_1| |b_1| \cos \theta \cos(|\phi_{a_1} - \phi_{b_1}|) \right] = \frac{9}{4} S_2.$$
(1.111)

Por lo tanto, si dQ tiene sólo contribuciones dipolares, puede escribirse como [19]

$$dQ(\theta,\phi) = \frac{9}{4\pi x^2} \left[S_2 \cos^2 \phi + S_2 \sin^2 \phi \right].$$
(1.112)

Puesto que las condiciones de Kerker se cumplen cuando $a_1 = b_1$ (retroesparcimiento nulo) o $a_1 = -b_1$ (esparcimiento frontal nulo), es evidente que las magnitudes de ambos coeficientes deben ser iguales $|a_1| = |b_1|$ en cualquiera de los casos. En cuanto a las fases, primero se analizará cuando la diferencia de fase $\Delta = |\phi_{a_1} - \phi_{b_1}|$ es cero. Es decir, cuando los dipolos oscilan en fase, por lo que las Ecs. (1.110) y (1.111) se reducen a

$$\tau = |S_1|_{\Delta=0}^2 = |S_2|_{\Delta=0}^2 = \frac{9}{4} \left[|a_1|^2 (1 + \cos^2 \theta) + 2|a_1|^2 \cos \theta \right] = \frac{9}{4} |a_1|^2 \left(1 + \cos^2 \theta + 2\cos \theta \right).$$
(1.113)

La función $1 + \cos \theta + 2\cos^2 \theta$ alcanza su valor máximo en $\theta = 0$ y el mínimo en $\theta = \pi$ [curva roja en Fig. 1.16(b)]. Por tanto, cuando los dipolos eléctrico y magnético oscilan en fase y sus magnitudes son iguales, el retroesparcimiento se anula (primera condición de Kerker) [75]. Por otro lado, considerando el caso en que $\Delta = \pi$, se obtiene que

$$\nu = |S_1|_{\Delta=\pi}^2 = |S_2|_{\Delta=\pi}^2 = \frac{9}{4} \left[|a_1|^2 (1 + \cos^2 \theta) - 2|a_1|^2 \cos \theta \right] = \frac{9}{4} |a_1|^2 \left(1 + \cos^2 \theta - 2\cos \theta \right).$$
(1.114)

En este caso, la función dependiente de θ tiene su valor máximo para $\theta = \pi$ y el mínimo para $\theta = 0$ [curva azul en Fig. 1.16(b)]. Por ello, cuando los dipolos oscilan fuera de fase, $\pi/2$, y sus magnitudes son iguales, el esparcimiento frontal es nulo (segunda condición de Kerker) [75].

Las condiciones originales de Kerker pueden ser extendidas a esparcidores aislados con forma arbitraria o a conjuntos de partículas. Asimismo, el esparcimiento puede ser eliminado para otras direcciones y los multipolos que generan la interferencia no se limitan a los dipolares [34]. Particularmente, las partículas dieléctricas con un alto índice de refracción soportan modos de órdenes superiores a los dipolares. Al aumentar el orden de los modos multipolares, la direccionalidad del esparcimiento también incrementa. Esta característica se debe a que al aumentar el orden del multipolo, los lóbulos del patrón de radiación asociado son más angostos en comparación a los de orden menor [ver Fig. 1.11], por lo que el esparcimiento se produce en un ángulo sólido menor [62]. En la Fig. 1.17 (renglón central) se muestran los patrones de radiación correspondientes a los dipolos y cuadrupolos, tanto eléctricos como magnéticos; las gráficas polares para cada multipolo se obtuvieron en los planos $\phi = 0$ (curvas anaranjadas) y $\phi = \pi/2$ (curvas azules). Las flechas azules y rojas punteadas representan al campo eléctrico en cada una de las direcciones $\theta = 0$ y $\theta = \pi$, respectivamente. Se asume también que el vector de onda incidente k_i viaja de izquierda a derecha, como se indica en el patrón del dipolo eléctrico (flecha negra punteada). La interferencia de los modos fundamentales se muestra en la Fig. 1.17(c): la primera condición de Kerker (dipolos en fase) se muestra con la curva azul punteada, mientras que la segunda condición de

Kerker (dipolos en desfase) corresponde a la curva roja punteada. En las Figs. 1.17(a), 1.17(b), 1.17(d) y 1.17(e) se aumenta la direccionalidad del esparcimiento respecto al resultado de la Fig. 1.17(c), pues al menos un cuadrupolo está incluido en el fenómeno de interferencia. El patrón de radiación con mayor direccionalidad se obtiene cuando los cuatro multipolos interfieren entre sí [ver Fig. 1.17(e)].



Fig. 1.17: Patrones de radiación de los dipolos y cuadrupolos, tanto eléctricos como magnéticos (renglón central). Las curvas anaranjadas corresponden al plano $\phi = 0$, mientras que las azules a $\phi = \pi/2$. La dirección del vector de onda incidente \mathbf{k}_i es de izquierda a derecha, como se indica en el diagrama del dipolo eléctrico (flecha negra punteada). Las flechas azules punteadas indican la orientación del campo eléctrico en las direcciones $\theta = 0$ o $\theta = \pi$; estas orientaciones generan retroesparcimiento nulo. Se agregan las flechas rojas punteadas en los patrones de radiación del dipolo magnético y del cuadrupolo eléctrico para ejemplificar el caso de esparcimiento frontal nulo. En (a) y (b) se muestran los patrones de radiación resultantes de la interferencia de los dipolos eléctrico y magnético para el caso de retroesparcimiento nulo. En (c) se muestra el resultado de la interferencia de los dipolos eléctrico y magnético para la primera (curva azul punteada) y segunda (curva roja punteada) condición de Kerker. De forma análoga, en (d) se muestra el resultado de la interacción de ambos cuadrupolos para las dos condiciones de Kerker. Por último, (e) corresponde al patrón de radiación resultante de la interacción de los cuatro multipolos.

El identificar la orientación del campo eléctrico en las direcciones $\theta = 0$ y $\theta = \pi$ para cada multipolo, permite determinar las posibles combinaciones para producir esparcimiento direccional. Cuando el campo eléctrico en la dirección de retroesparcimiento es paralelo a la orientación del campo eléctrico en la dirección frontal, se dice que la paridad es par. Por el contrario, si en dichas direcciones las orientaciones del campo eléctrico son opuestas entre sí, la paridad es impar [34]. En general, las paridades de multipolos de la misma naturaleza y órdenes adyacentes son opuestas, por ejemplo, en la Fig. 1.17 se muestra que el dipolo eléctrico tiene una paridad par, mientras que la del cuadrupolo eléctrico es impar. Las paridades también son opuestas en el caso de multipolos del mismo orden, pero de diferente naturaleza (un ejemplo son los dipolos eléctrico y magnético). Esta regla se manifiesta en la expresión de la eficiencia de retroesparcimiento [Ec. (1.91)], donde el término $(-1)^n$ indica que multipolos de la misma naturaleza (eléctrica o magnética) y órdenes adyacentes tienen paridades opuestas. Por otro lado, el término $(a_n - b_n)$ señala que las paridades serán opuestas para multipolos de diferentes clases [34, 76]. Es por esto que una familia de multipolos, ya sea eléctrico o magnético, también puede presentar esparcimiento direccional [77]. Una versión generalizada de la primera condición de Kerker puede ser deducida a partir de la eficiencia de retroesparcimiento [Ec (1.91)], suponiendo que se tiene una esfera sobre la que se inducen sólo el dipolo y cuadrupolo eléctricos (como puede ser en partículas plasmónicas)

$$Q_{scat}^{\text{back}} \approx \frac{1}{4\pi x^2} \left| 3a_1 - 5a_2 \right|^2,$$
 (1.115)

por tanto, para que el retroesparcimiento sea nulo, la Ec. (1.115) debe ser igual a cero, es decir [78]

$$3a_1 - 5a_2 = 0. \tag{1.116}$$

Análogamente, si la partícula sólo soporta al dipolo y cuadrupolo magnéticos, la condición es

$$3b_1 - 5b_2 = 0. (1.117)$$

La extensión de las condiciones originales de Kerker a multipolos de orden mayor al fundamental no sólo permiten obtener patrones de esparcimiento con mayor direccionalidad, sino que también abre la posibilidad de anular el retroesparcimiento y el esparcimiento frontal simultáneamente [70, 79].

3.1 Efecto Brewster generalizado

En la subsección 1.2.1 se describió la naturaleza del efecto Brewster en materiales dieléctricos sin respuesta magnética. Se concluyó que sólo para luz con polarización p es posible obtener un ángulo de Brewster, cuyo valor está determinado por la Ec. (1.26). El efecto Brewster puede ser generalizado al considerar que al menos uno de los medios es magnético. En este caso, las propiedades ϵ y μ del material determinan el valor del ángulo de incidencia para el cual aparece un ángulo tipo Brewster [80]. Suponiendo que el medio donde se propaga el haz incidente es el vacío ($\epsilon_i = 1, \mu_i = 1$) se tiene que [81]

$$\tan^2 \theta_B = \frac{\epsilon_t \left(\epsilon_t - \mu_t\right)}{\epsilon_t \mu_t - 1}, \qquad \epsilon_t \ge \mu_t$$
(1.118)

$$\tan^2 \theta_B = \frac{\mu_t \left(\mu_t - \epsilon_t\right)}{\epsilon_t \mu_t - 1}, \qquad \mu_t \ge \epsilon_t \tag{1.119}$$

donde ϵ_t y μ_t son la permitividad y permeabilidad relativas del material por el cual viaja la onda trasmitida, respectivamente. En la Fig. 1.18 se grafica la reflectancia para ambas polarizaciones en función del ángulo de incidencia para dos configuraciones diferentes: En primer lugar, se estudia el efecto *clásico* Brewster en una interfaz aire-vidrio (para el vidrio se consideró que $\epsilon_t = 2.25$ y $\mu_t = 1$) y los resultados se muestran en la Fig. 1.18(a). De la figura se puede observar que el efecto Brewster sólo aparece para polarización p. En segundo lugar se considera que el medio en el que se transmite la onda es un material con propiedades ópticas $\epsilon_t = 1$, $\mu_t = 2.25$. En la Fig. 1.18(b) se presentan los resultados; las curvas muestran que, en este caso, se obtiene un ángulo tipo Brewster sólo para la polarización s.

El efecto Brewster se generaliza al considerar materiales que exhiben respuestas eléctricas y magnéticas. En general, estos materiales presentan una permitividad eléctrica y una permeabilidad magnética relativas distintas de la unidad. En este caso, se considera que dentro del material se induce no sólo el dipolo eléctrico sino también el dipolo magnético. Las radiaciones de ambos dipolos están presentes e interfieren entre sí, existiendo direcciones particulares en las que la radiación colectiva de ambos dipolos, debido a la interferencia destructiva, es nula [ver Fig. 1.19(a)] [38]. Al considerar multipolos de mayor orden que los dipolares, existen efectos de la interferencia multipolar que generan patrones de radiación asimétricos, y



Fig. 1.18: Reflectancia en función del ángulo de incidencia para un medio semi-infinito con (a) $\epsilon_t = 2.25$ y $\mu_t = 1$; y (b) $\epsilon_t = 1$ y $\mu_t = 2.25$. Se considera que el medio de incidencia es aire: $\epsilon_i = 1$, $\mu_i = 1$. La polarización s se identifica con el color azul y la polarización p con morado.

debido a las condiciones generalizadas de Kerker, puede aparece un efecto análogo al ángulo de Brewster. La inhibición de radiación puede ocurrir para cualquier ángulo y en cualquiera de los planos de oscilación de alguno de los dipolos [38]. Por tal motivo, este efecto seudo-Brewster puede existir para ambas polarizaciones y cualquier ángulo de incidencia. Es importante hacer notar que este efecto no se puede obtener para ambas polarizaciones simultáneamente con el mismo ángulo de incidencia y la misma longitud de onda. Esto sólo es posible para incidencia normal y cuando $\epsilon = \mu$. En tal caso se inducen dipolos con la misma magnitud y se obtiene la primera condición de Kerker [38].

Puesto que las partículas esféricas son capaces de exhibir respuesta magnética, es posible pensar que en una arreglo de partículas esféricas se puede observar el efecto Brewster generalizado. Para tal sistema, es posible conectar los fenómenos tipo Kerker con el efecto Brewster generalizado; para ello, se estudia el campo eléctrico producido por los dipolos eléctrico y magnético inducidos en las partículas que forman el arreglo. En primer lugar, se considera que la onda incidente induce oscilaciones de los dipolos, los cuales radian en todas las direcciones. El campo resultante es la superposición de los campos incidente y del proveniente de los dipolos. Su superposición resulta en la cancelación del campo incidente, quedando sólo los campos transmitido y reflejado [82]. Retomando la expresión para el campo lejano con sólo contribuciones dipolares [Ec. (1.101)], esta vez agregando el término de sus fases temporal y espacial, se tiene que [19]

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_p + \mathbf{E}_m = \frac{k_i^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\mathbf{\hat{n}} \times (\mathbf{p} \times \mathbf{\hat{n}}) e^{i(\omega_p t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} + \phi_p)} + \frac{1}{c} (\mathbf{m} \times \mathbf{\hat{n}}) e^{i(\omega_m t - \mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r} + \phi_m)} \right], \quad (1.120)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector unitario que apunta en la dirección hacia la cual es esparcida la luz. En particular, se estudia la dirección de propagación de la onda reflejada, \mathbf{k}_r . Además, se considera que la frecuencia angular de la onda incidente, ω_i , es igual a las frecuencias angulares de las ondas radiadas por los dipolos magnético y eléctrico (ω_m , $y \omega_p$, respectivamente). Asimismo, $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_p = \mathbf{k}_m$, siendo \mathbf{k}_p el vector de onda del campo radiado por el dipolo eléctrico y \mathbf{k}_m el campo radiado por el dipolo magnético. El plano de incidencia corresponde al plano XZ y la interfaz entre los medios al plano XY. Por lo que, el ángulo incidente θ_i se mide respecto al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$ [19].

En el caso de polarización p, el momento dipolar eléctrico inducido forma un ángulo $\theta_i - \pi/2$ respecto a la normal a la superficie [ver Fig. 1.19(b)]. El momento dipolar eléctrico, m, es paralelo al eje $\hat{\mathbf{e}}_y$ y el vector \mathbf{K}_r corresponde a la dirección de la onda reflejada. Por tanto, la tríada de vectores en coordenadas cartesianas es [19]

$$\mathbf{p} = p \left[\sin \left(\theta_i - \pi/2 \right) \mathbf{\hat{e}}_x + \cos \left(\theta_i - \pi/2 \right) \mathbf{\hat{e}}_z \right], \tag{1.121a}$$

$$\mathbf{m} = m \,\hat{\mathbf{e}}_y,\tag{1.121b}$$

$$\mathbf{K}_r = \sin(-\theta_i)\,\mathbf{\hat{e}}_x + \cos(-\theta_i)\,\mathbf{\hat{e}}_z. \tag{1.121c}$$



Fig. 1.19: (a) Efecto Brewster generalizado obtenido con un material dieléctrico con respuesta eléctrica y magnética, $\epsilon \neq 1$ y $\mu \neq 1$. El patrón de radiación corresponde a la línea azul claro. Su asimetría proviene de la interferencia de los dipolos eléctrico, **p**, y magnético, **m**, excitados dentro del material por la onda transmitida. Los diagramas en (b) y (c) ilustran la configuración de los vectores **p**, **m**, y **K**_r para polarización p y s, respectivamente. Las partículas esféricas se encuentran sobre el eje $\hat{\mathbf{e}}_x$.

Sustituyendo las expresiones de las Ecs. (1.121) en la Ec. (1.120) se obtiene que el campo lejano es [19]

$$\mathbf{E} = \left[\cos\theta_i \left(me^{i\phi_m} - pe^{i\phi_p}\cos 2\theta_i\right) \mathbf{\hat{e}}_x + \sin\theta_i \left(me^{i\phi_m} - pe^{i\phi_p}\cos 2\theta_i\right) \mathbf{\hat{e}}_z\right] e^{i(\omega_i t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})}.$$
 (1.122)

De la Ec. (1.122) se obtiene que si m = 0 y $p \neq 0$, el campo se anula para $\theta_i = \pi/4$. Para el caso contrario, $m \neq 0$ y p = 0, no es posible suprimir la reflexión para ningún ángulo de incidencia. En cambio, cuando ambos dipolos están presentes, $m \neq 0$ y $p \neq 0$, la reflexión es cero para

$$\cos 2\theta_i = \frac{m}{p} e^{i\Delta},\tag{1.123}$$

donde Δ es la diferencia de fase entre los dipolos eléctrico y magnético. Puesto que θ_i es un valor real, la diferencia de fases debe ser 0 o π para satisfacer la Ec. (1.123).

Por otra parte, para polarización s, el campo eléctrico incidente \mathbf{E}_i es paralelo al eje \mathbf{e}_y , al igual que el momento dipolar eléctrico p. Por tanto, el vector asociado al momento dipolar magnético forma un ángulo $\theta_i - \pi/2$ respecto al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$ [ver Fig. 1.19(c)]. En coordenadas cartesianas, los vectores p, m y \mathbf{K}_r son [19]

$$\mathbf{p} = p \,\hat{\mathbf{e}}_y,\tag{1.124a}$$

$$\mathbf{m} = m \left[\sin \left(\theta_i - \pi/2 \right) \mathbf{\hat{e}}_r + \cos \left(\theta_i - \pi/2 \right) \mathbf{\hat{e}}_r \right], \tag{1.124b}$$

$$\mathbf{K}_{r} = \sin(-\theta_{i})\mathbf{\hat{e}}_{r} + \cos(-\theta_{i})\mathbf{\hat{e}}_{r}, \qquad (1.124c)$$

respectivamente. El campo lejano se escribe como [19]

$$\mathbf{E} = \left[\cos\theta_i \left(p e^{i\phi_p} - m e^{i\phi_m} \cos 2\theta_i\right) \hat{\mathbf{e}}_x + \sin\theta_i \left(p e^{i\phi_p} - m e^{i\phi_m} \cos 2\theta_i\right) \hat{\mathbf{e}}_z\right] e^{i(\omega_i t - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})}.$$
 (1.125)

De la Ec. (1.125) se tiene que si $m \neq 0$ y p = 0, la reflexión es nula para $\theta_i = \pi/4$. En cambio, si m = 0 y $p \neq 0$, la reflexión siempre es distinta de cero, sin importar el ángulo incidente. Para el caso en que ambos dipolos están presentes, se requiere que [19]

$$\cos 2\theta_i = \frac{p}{m} e^{i\Delta},\tag{1.126}$$

para anular la reflexión. Para que θ_i sea una cantidad real, la diferencia de fases debe ser 0 o π , además, es necesario que se cumpla que $p \le m$.

Como ya se mencionó, el efecto Brewster generalizado se puede obtener para ambas polarizaciones cuando el material presenta respuesta tanto eléctrica como magnética. Además, el efecto guarda relación con las condiciones de Kerker. Por ello, es factible pensar que partículas esféricas puedan ser una alternativa para diseñar metamateriales que presenten el efecto Brewster generalizado. De hecho, en 2016 se demostró que un arreglo ordenado de partículas esféricas de silicio muestra ángulos de Brewster para ambas polarizaciones [38]. Por lo anterior se espera que para un arreglo desordenado de partículas esféricas también se observen ángulos de Brewster para ambas polarizaciones.

4 MODELO DE ESPARCIMIENTO COHERENTE

El análisis de la respuesta óptica de un arreglo de partículas esféricas desordenadas se realiza a través de un modelo de esparcimiento múltiple, denominado *modelo de esparcimiento coherente (CSM)* [47, 48]. El modelo permite considerar partículas esféricas de cualquier tamaño, incluso aquellas comparables a la longitud de onda. Cuando las partículas son de un tamaño comparable a la longitud de onda incidente, las ondas esparcidas tienen una componente coherente (radiación EM que viaja en una sola dirección) y una difusa (radiación EM esparcida en diferentes direcciones). La parte coherente también se conoce como el campo promedio, mientras que la parte difusa se relaciona con las fluctuaciones del promedio [48]. En la Fig. 1.20(a) se ilustra una monocapa de partículas esféricas idénticas cuyos centros se encuentran sobre el mismo plano (en gris). Se considera que las partículas son iluminadas por una onda EM, cuyo vector de onda k_i (flecha verde) forma un ángulo θ_i respecto a la normal del plano que contiene a las partículas. Las componentes coherentes de los campos reflejados y transmitidos se indican con rojo y azul, respectivamente, mientras que las flechas negras representan a la componente difusa.



Fig. 1.20: (a) Monocapa de partículas esféricas con índice de refracción n_p suspendida en el espacio libre (sin sustrato). (b) Monocapa de partículas esféricas soportada sobre un sustrato, cuyo índice de refracción se denota con n_s , en incidencia externa. Ambos sistemas se encuentran inmersos en una matriz de índice de refracción n_m . La onda inicial (vector de onda \mathbf{k}_i^{coh} , color verde) incide con un ángulo θ_i respecto a la normal ($\hat{\mathbf{e}}_z$). Las ondas reflejada (rojo) y transmitida (azul) se representan por vectores de onda \mathbf{k}_r^{coh} , respectivamente.

A través del modelo CSM se derivan las expresiones para los coeficientes de reflexión y transmisión coherente asociados a una monocapa de partículas sin considerar al sustrato [Fig. 1.20(a)]. A partir de los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes, se determinan las expresiones para la reflexión y transmisión asociadas a la monocapa soportada por un sustrato [Fig. 1.20(b)]. Se obtienen expresiones

tanto para incidencia interna como externa. Por tanto, en esta sección, se inicia con el análisis para la monocapa suspendida en espacio libre (sin sustrato) para, finalmente, estudiar el sistema completo (monocapa de partículas más sustrato, ver Figs. 1.20) agregando los efectos debidos a la presencia del sustrato.

4.1 Monocapa desordenada suspendida en el espacio libre

Con el propósito de calcular los coeficientes de amplitud de reflexión y transmisión del CSM, se considera una monocapa compuesta por partículas esféricas, todas de radio *a* y compuestas del mismo material, cuya permitividad dieléctrica se denota con $\epsilon_p(\omega)$. La monocapa se encuentra suspendida en el espacio libre, sin soporte. Además, se considera que los centros de cada partícula están contenidos en una capa de ancho *d* y que su distribución es aleatoria [47]. El campo eléctrico de la onda EM plana incidente se escribe como $\mathbf{E}_i = E_0 e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_i$, donde $\hat{\mathbf{e}}_i$ es un vector unitario que indica la polarización de la onda incidente. La onda EM incide con un ángulo θ_i respecto al eje normal a la monocapa, es decir, $\hat{\mathbf{e}}_z$ [ver Fig. 1.20(a)]. Las dimensiones de la monocapa en las direcciones $\hat{\mathbf{e}}_x$ y $\hat{\mathbf{e}}_y$ se consideran mucho mayores que el radio y la longitud de onda EM incidente. Se define la fracción de llenado volumétrica, *f*, como el cociente del volumen ocupado por todas las partículas dividido por el volumen de la capa [47]. En la Fig. 1.21 se ilustra a las partículas (en verde) cuyos centros están dentro de la capa de ancho *d* (zona gris).



Fig. 1.21: Onda EM con campo eléctrico \mathbf{E}_i que incide con un ángulo θ_i respecto a la normal $(\mathbf{\hat{a}}_z)$ sobre una monocapa de partículas esféricas distribuidas de forma aleatoria. La capa que contiene a los centros de las partículas tiene un ancho d y se divide por la mitad con el plano z = 0, formando dos subcapas de grosor d/2. Las ondas \mathbf{E}_t^{exc} y \mathbf{E}_r^{exc} se reflejan y transmiten, según la SSA, al incidir sobre el plano z = 0. En los recuadros 1 y 2 se ilustran las reflexiones y transmisiones de los campos \mathbf{E}_t^{exc} y \mathbf{E}_r^{exc} , respectivamente. Las nuevas ondas resultantes que se propagan en la dirección de incidencia se indican con las flechas rojas.

Dentro de la aproximación de esparcimiento individual (*Single Scattering Approximation*, SSA)—la cual considera que el campo EM incidente es el único que excita a las partículas, ignorando el campo esparcido por cada resonador [83]—, las ondas coherentes reflejadas y transmitidas por la monocapa, fuera de la región del espacio ocupado por las partículas, están dadas por [47]

$$\left\langle \mathbf{E}_{r}^{scat}\right\rangle = -\mathbf{E}_{0}\alpha \frac{\sin(k_{zi}d)}{k_{zi}d}S_{n}\left(\pi - 2\theta_{i}\right),\tag{1.127a}$$

$$\left\langle \mathbf{E}_{t}^{scat}\right\rangle =-\mathbf{E}_{0}\alpha S\left(0\right),\tag{1.127b}$$

donde $\langle \mathbf{E}_r^{scat} \rangle$ corresponde a la onda reflejada y $\langle \mathbf{E}_t^{scat} \rangle$ a la transmitida, con $\langle ... \rangle$ representando al promedio configuracional, con \mathbf{E}_0 el vector de amplitud de la onda incidente, y k_{zi} es la componente en z

del vector de onda incidente. El subíndice *n* toma valores iguales a 1 o 2, dependiendo de si la polarización de la onda incidente es *s* o *p*, respectivamente. $S_1(\theta)$ y $S_2(\theta)$ son los elementos diagonales de la matriz de amplitud de esparcimiento; $S(0) \equiv S_1(\theta = 0) = S_2(\theta = 0)$ es la amplitud de esparcimiento frontal. Por último, el factor α está dado por [47]

$$\alpha = \frac{k_m d}{\cos \theta_i} \frac{3f}{2x_m^3},\tag{1.128}$$

donde $k_m = k_0 n_m$ es la magnitud del vector de onda dentro de la matriz y $x_m = k_m a$ el parámetro de tamaño. El coeficiente de reflexión coherente de una monocapa diluida y desordenada de partículas esféricas, dentro de la SSA, se calcula al dividir el campo eléctrico coherente esparcido en el hemisferio de reflexión (el medio de incidencia) entre la amplitud de la onda incidente. De forma análoga, el coeficiente de transmisión coherente se obtiene sumando la onda incidente al campo coherente esparcido en el hemisferio de nel hemisferio de transmisión y dividiendo entre la amplitud de la onda incidente. Al considerar el límite $d \rightarrow 0$ se obtiene que [47]

$$t_{coh}^{SSA} = 1 - \alpha S(0),$$
 (1.129a)

$$r_{coh}^{SSA} = -\alpha S_n \left(\pi - 2\theta_i \right). \tag{1.129b}$$

Dentro del límite $d \to 0$, la fracción de llenado volumétrica se puede escribir como $f = (4a)/(3d)\Theta$, donde $\Theta = N(\pi a^2)/A$ corresponde a la fracción de cubierta. Por lo que α se reescribe como

$$\alpha = \frac{2\Theta}{x_m^2 \cos \theta_i}.$$
(1.130)

La fracción de cubierta Θ corresponde al área proyectada por todas las esferas sobre el área de la placa. La distancia mínima promedio $\langle D_{min} \rangle$) entre las partículas que forman a la monocapa se puede calcular a partir de la fracción de cubierta mediante la expresión $\Theta = \pi a^2/(2a + \langle D_{min} \rangle)^2$. Cabe destacar que $\langle D_{min} \rangle$ corresponde a la distancia entre la superficie de dos partículas contiguas. Por tanto, la separación mínima promedio entre las partículas de la monocapa es [84]

$$\frac{\langle D_{min} \rangle}{a} = \sqrt{\frac{\pi}{\Theta}} - 2. \tag{1.131}$$

La SSA está limitada a ángulos de incidencia pequeños, puesto que los coeficientes en las Ecs. (1.129) divergen cuando el ángulo de incidencia se aproxima a $\pi/2$, pues $\alpha \to \infty$. Además, el cuadrado de la magnitud del coeficiente de transmisión puede ser mayor a 1 cuando el radio de la partícula y la longitud de onda incidente son comparables.

Con el fin de corregir los cálculos realizados con sólo la SSA, el campo eléctrico que excita a las partículas (\mathbf{E}^{exc}) debe contener las contribuciones provenientes del esparcimiento múltiple [47]. Para ello, la capa que contiene a los centros de las partículas se divide en dos subcapas de ancho d/2 cada una y se calcula el campo promedio en el plano que las separa, es decir, sobre el plano z = 0 (señalado con una línea verde punteada en la Fig. 1.21). De esta forma, cualquiera de las partículas es iluminada en promedio por los campos esparcidos por el resto de las esferas y el campo incidente [47].

El campo eléctrico \mathbf{E}^{exc} , en el plano z = 0, se considera como la suma de dos ondas planas. Una de las ondas se propaga en la misma dirección que la onda incidente, \mathbf{E}_t^{exc} , mientras que la otra onda, \mathbf{E}_r^{exc} , viaja en la dirección de reflexión especular. Por tanto, el campo que excita a las partículas se puede escribir como [47]

$$\mathbf{E}^{exc} = E_t^{exc} e^{i\mathbf{k}_i^{coh} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_i + E_r^{exc} e^{i\mathbf{k}_r^{coh} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_r, \qquad (1.132)$$

donde $\mathbf{k}_i^{coh} = k_m \sin \theta_i \hat{\mathbf{e}}_x + k_m \cos \theta_i \hat{\mathbf{e}}_z$ y $\mathbf{k}_r^{coh} = k_m \sin \theta_i \hat{\mathbf{e}}_x - k_m \cos \theta_i \hat{\mathbf{e}}_z$, siendo $\hat{\mathbf{e}}_i$ y $\hat{\mathbf{e}}_r$ los vectores unitarios asociados a la polarización de las ondas incidente y reflejada especularmente, respectivamente [47].

Para calcular los campos promedio en cualquier punto del espacio se suma el campo incidente a los campos promedio esparcido por todas las partículas en la monocapa. El campo radiado dentro de la monocapa se calcula en cualquier punto del espacio excepto dentro de las partículas (que se consideran como esparcidores de Mie puntuales). Además, se asume que, independientemente de la ubicación de las esferas, existen sólo dos direcciones en las que el campo esparcido interfiere constructivamente. Con esto, las ondas planas que excitan a las partículas dentro de la monocapa [Ec. (1.132)] son, en promedio, los únicos campos incidentes en cualquiera de ellas. A través de las Ecs. (1.129) se conoce cómo se reflejan y transmiten los campos E_t^{exc} y E_r^{exc} en cada una de las dos subcapas [47].

En z = 0, el campo promedio que viaja en la dirección de incidencia, \mathbf{E}_t^{exc} , está dado por el campo incidente más los campos radiados por la subcapa superior en la misma dirección. Los campos radiados son aquellos que se transmiten y reflejan dentro de la subcapa superior de partículas (-d/2 < z < 0), y se calculan usando la SSA. Se considera que $E_t^{exc}e^{i\mathbf{k}_i^{coh}\cdot\mathbf{r}}\hat{\mathbf{e}}_i$ es una onda plana que se propaga en la capa superior e incide en el plano z = 0 desde arriba (ver recuadro 1 en la Fig. 1.21). Por otro lado, $E_r^{exc}e^{i\mathbf{k}_r^{coh}\cdot\mathbf{r}}\hat{\mathbf{e}}_r$ se considera como una onda que incide desde abajo (ver recuadro 2 en la Fig. 1.21). Ambas ondas se reflejan y transmiten al incidir en el plano z = 0. Es necesario que el campo promedio en z = 0 sea igual al campo que excita a las partículas, por ello, se consideran sólo a los campos radiados que se propagan en la dirección \mathbf{k}_i^{coh} (flechas azules en la Fig. 1.21). Por lo cual se obtiene que [47]:

$$E_t^{exc} e^{i\mathbf{k}_i^{coh} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{\hat{e}}_i = \left[E_0 - \frac{1}{2} \alpha S(0) E_t^{exc} - \frac{1}{2} \alpha S_n(\pi - 2\theta_i) E_r^{exc} \right] e^{i\mathbf{k}_i^{coh} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{\hat{e}}_i.$$
(1.133)

Por otro lado, para calcular los campos radiados por la subcapa inferior, se considera nuevamente que $E_t^{exc}e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}\hat{\mathbf{e}}_i$ corresponde a la onda plana que incide en el plano z = 0 desde arriba y $E_r^{exc}e^{i\mathbf{k}_r\cdot\mathbf{r}}\hat{\mathbf{e}}_r$ la que incide por debajo. En este caso se consideran los campos que se propagan en la dirección \mathbf{k}_r^{coh} (flechas rojas en la Fig. 1.21), obteniendo que [47]

$$E_r^{exc} e^{i\mathbf{k}_r^{coh} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{\hat{e}}_r = \left[-\frac{1}{2} \alpha S_n (\pi - 2\theta_i) E_t^{exc} - \frac{1}{2} \alpha S(0) E_r^{exc} \right] e^{i\mathbf{k}_r^{coh} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{\hat{e}}_r.$$
(1.134)

En las Ecs. (1.133) y (1.134) se agrega el factor 1/2 debido a que el grosor de las subcapas superior e inferior es la mitad de la capa total. Además, se consideró que una onda plana viajando en la dirección incidente, cuando se refleja en la capa de partículas, cambia su polarización de $\hat{\mathbf{e}}_i$ a $\hat{\mathbf{e}}_r$. Resolviendo las Ecs. (1.133) y (1.134) en términos del campo incidente \mathbf{E}_0 se obtiene que

$$\mathbf{E}_{t}^{exc} = \frac{1 + \frac{1}{2}\alpha S_{n}(0)}{1 + \alpha S(0) + \frac{1}{4}\alpha^{2} \left[S^{2}(0) - S_{n}^{2}(\pi - 2\theta_{i})\right]} \mathbf{E}_{0},$$
(1.135)

у

$$\mathbf{E}_{r}^{exc} = \frac{-\frac{1}{2}\alpha S_{n}(\pi - 2\theta_{i})}{1 + \alpha S(0) + \frac{1}{4}\alpha^{2} \left[S^{2}(0) - S_{n}^{2}(\pi - 2\theta_{i})\right]} \mathbf{E}_{0}.$$
 (1.136)

Por último, para calcular los coeficientes de transmisión y reflexión de la onda promedio, se calculan los campos promedio fuera de la monocapa de partículas, sumando el campo incidente con los campos radiados promedio. Los campos esparcidos se calculan considerando que las dos ondas planas, dadas por las Ecs. (1.135) y (1.136), están excitando a todas las partículas, y haciendo uso de las ecuaciones de la SSA para calcular las reflexiones y las transmisiones. El campo eléctrico esparcido promedio considerando el esparcimiento múltiple, $\langle \mathbf{E}_{MS}^{scat} \rangle$, toma en cuenta a las reflexiones y a las transmisiones de \mathbf{E}^{exc} según la SSA dentro del límite $d \to 0$ y la contribución del campo incidente \mathbf{E}_i . Por lo tanto, los campos transmitidos y reflejados promedios pueden ser escritos de la siguiente manera [47]

$$\left\langle \mathbf{E}_{r,coh}^{scat} \right\rangle = \left\langle \mathbf{E}_{r,MS}^{scat} \right\rangle = \left[-\alpha S_n (\pi - 2\theta) E_t^{exc} - \alpha S(0) E_r^{exc} \right] \hat{\mathbf{e}}_i e^{i\mathbf{k}_r^{coh} \cdot \mathbf{r}}, \tag{1.137a}$$

$$\left\langle \mathbf{E}_{t,coh}^{scat} \right\rangle = \mathbf{E}_{i} + \left\langle \mathbf{E}_{t,MS}^{scat} \right\rangle = \left[E_{0} - \alpha S_{n} (\pi - 2\theta) E_{r}^{exc} - \alpha S(0) E_{t}^{exc} \right] \mathbf{\hat{e}}_{i} e^{i \mathbf{k}_{t}^{coh} \cdot \mathbf{r}}, \tag{1.137b}$$

donde se han utilizado las fórmulas del SSA, Ecs. (1.127), asumiendo que $k_{zi}d \ll 1$. Los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes están dados por $r_{coh} = \left\langle \mathbf{E}_{r,coh}^{scat} \right\rangle / E_0$ y $t_{coh} = \left\langle \mathbf{E}_{t,coh}^{scat} \right\rangle / E_0$, respectivamente. Considerando el límite $d \rightarrow 0$, los coeficientes de reflexión y transmisión para una monocapa de partículas están dados por [47]

$$r_{coh} = \frac{-\alpha S_n(\pi - 2\theta_i)}{1 + \alpha S(0) + \frac{1}{4}\alpha^2 \left[S^2(0) - S_n^2(\pi - 2\theta_i)\right]},$$
(1.138a)

$$t_{coh} = \frac{1 - \frac{1}{4}\alpha \left[S^2(0) - S_n^2(\pi - 2\theta_i)\right]}{1 + \alpha S(0) + \frac{1}{4}\alpha^2 \left[S^2(0) - S_n^2(\pi - 2\theta_i)\right]},$$
(1.138b)

respectivamente.

4.2 Monocapa desordenada soportada sobre un sustrato

Hasta este punto se han estudiado las propiedades ópticas de una monocapa desordenada de partículas esféricas suspendidas en el vacío, es decir, sin sustrato. Sin embargo, para fines prácticos, se debe considerar que la monocapa está soportada sobre un sustrato. En esta sección se obtienen los coeficientes de reflexión y transmisión asociados a un sistema compuesto por la monocapa de partículas soportada por un sustrato. El análisis se realiza tanto para una configuración de incidencia externa como interna.

De manera general, la monocapa de partículas se considerará como un plano efectivo localizado a una distancia a (radio de las partículas) de la interfaz entre la matriz y el sustrato. Dicho plano conserva las características ópticas de la monocapa. Por tanto, los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes asociados al plano efectivo están dados por las Ecs. (1.138a) y (1.138b), respectivamente. Por otro lado, el coeficiente de reflexión del sistema completo (monocapa de partículas y sustrato) se calcula considerando las múltiples reflexiones entre el plano descrito por la monocapa y el plano que corresponde a la interfaz matriz-sustrato.

Incidencia externa

Para el caso de incidencia externa, la onda incidente ilumina a la monocapa de partículas esféricas desde la matriz. En la Fig. 1.22 se muestra un diagrama del proceso de reflexión y transmisión que sufre la onda EM inicial al incidir con un ángulo θ_i respecto a la normal a la monocapa, eje $\hat{\mathbf{e}}_z$.

El análisis para el cálculo de los coeficientes de amplitud de reflexión y transmisión se describe a continuación. La onda inicial con campo E_i (flecha verde) incide sobre el plano efectivo z = a, y es tanto reflejada (① en la Fig. 1.22) como transmitida (② en la Fig. 1.22) de forma coherente. Dentro del espacio definido por el plano de la monocapa y la interfaz matriz–sustrato, la onda transmitida de campo $t_{coh}e^{i\beta_1}E_i$ sufre múltiples reflexiones (flechas rojas punteadas en la Fig. 1.22) [48]. La onda transmitida por la monocapa incide sobre la interfaz matriz-sustrato, transmitiéndose con un ángulo θ_t (③ en la Fig. 1.22). y reflejándose (④ en la Fig. 1.22). Tanto las múltiples transmisiones como la reflexiones en la interfaz matriz-sustrato están dados por los coeficientes de Fresnel usuales, t_{ms} y r_{ms} , respectivamente. Cabe destacar que, a partir del punto ② se introduce un término de fase $e^{i\beta_1}$, con $\beta_1 = ak_0n_m \cos \theta_i$, puesto que existe un retraso en la fase de la onda asociado al recorrido que realiza entre el plano en z = a y la interfaz matriz-sustrato. Por lo que cada vez que la onda recorre dicho trayecto debe agregarse el término $e^{i\beta_1}$. Por ejemplo, en ④, la onda ha atravesado dos veces el espacio entre el plano y la matriz, por ello se agrega $e^{2i\beta_1}$. Después del punto ④, la onda resultante se transmite (⑤ en la Fig. 1.22) y refleja (⑥ en la Fig. 1.22) debido a la monocapa. El proceso continúa de forma infinita, por lo que para el coeficiente de amplitud de reflexión se consideran los campos que se radian hacia la matriz, puesto que



Fig. 1.22: Monocapa desordenada de partículas de radio *a* soportada en un sustrato con índice de refracción n_s , e inmersas en una matriz con índice de refracción n_m , en configuración de incidencia externa. La onda inicial, con campo eléctrico \mathbf{E}_i (flecha verde), incide con un ángulo θ_i sobre la interfaz matriz–sustrato respecto a la normal, $\hat{\mathbf{e}}_z$. El plano efectivo asociado a la monocapa (z = a) se indica con una línea punteada rosa. Se indican las reflexiones y transmisiones coherentes debidas a la monocapa de partículas junto a las reflexiones y transmisiones asociadas a la interfaz matriz–sustrato.

corresponden a las ondas reflejadas por el sistema, de modo que [48]

$$r = r_{coh} (\theta_i) + r_{ms} (\theta_i) t_{coh}^2 (\theta_i) e^{2i\beta_1} + r_{coh} (\theta_i) r_{ms}^2 (\theta_i) t_{coh}^2 (\theta_i) e^{4i\beta_1} + \cdots + r_{coh}^2 (\theta_i) r_{ms}^3 (\theta_i) t_{coh}^2 (\theta_i) e^{6i\beta_1} + \cdots ,$$

$$= r_{coh} + r_{ms} t_{coh}^2 e^{2i\beta_1} \left(1 + r_{coh} r_{ms} e^{2i\beta_1} + r_{coh}^2 r_{ms}^2 e^{3i\beta_1} + \cdots \right)$$
(1.139)
$$= r_{coh} + r_{ms} t_{coh}^2 e^{2i\beta_1} \sum_{n=0}^{\infty} (r_{coh} r_{ms} e^{2i\beta_1})^n.$$

Cabe destacar que en la Ec. (1.139) todos los coeficientes de reflexión y transmisión son evaluados en el ángulo de incidencia θ_i . Por otro lado, considerando las ondas transmitidas hacia el sustrato, el coeficiente de transmisión se escribe como

$$t = t_{coh} (\theta_i) t_{ms} (\theta_i) e^{i\beta_1} + t_{coh} (\theta_i) r_{coh} (\theta_i) t_{ms} (\theta_i) r_{ms} (\theta_i) e^{3i\beta_1} + \dots + t_{coh} (\theta_i) r_{coh}^2 (\theta_i) t_{ms} (\theta_i) r_{ms}^2 e^{5i\beta_1} + \dots ,$$

$$= t_{coh} t_{ms} e^{i\beta_1} \left(1 + r_{coh} r_{ms} e^{2i\beta_1} + r_{coh}^2 r_{ms}^2 e^{4i\beta_1} + \dots \right) = t_{coh} t_{ms} e^{i\beta_1} \sum_{n=0}^{\infty} (r_{coh} r_{ms} e^{2i\beta_1})^n.$$
(1.140)

Dado que $||r_{coh}r_{ms}e^{2i\beta_1}|| < 1$, se utiliza la serie geométrica $\sum_{n=0}^{\infty} r^n = (1-r)^{-1}$, con r < 1, para reescribir los coeficientes de reflexión y transmisión como [47, 85]:

$$r = r_{coh}(\theta_i) + \frac{r_{ms}(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)e^{2i\beta_1}}{1 - r_{ms}(\theta_i)r_{coh}(\theta_i)e^{2i\beta_1}},$$
(1.141a)

$$t = \frac{t_{coh}(\theta_i)t_{ms}(\theta_i)e^{i\beta_1}}{1 - r_{coh}(\theta_i)r_{ms}(\theta_i)e^{2i\beta_1}},$$
(1.141b)

respectivamente.

Incidencia interna

Para el caso de incidencia interna, la onda inicial, E_i , incide desde el sustrato y posteriormente ilumina a la monocapa, como se muestra en la Fig. 1.23. En este caso, el desarrollo para obtener los coeficientes de

reflexión y transmisión es similar al realizado para incidencia externa, salvo que ahora hay que considerar que la onda incidente se transmite antes de incidir en la monocapa. El ángulo con el cual se transmite θ_t está dado por la ley de Snell:



$$\theta_t = \arcsin\left(\frac{n_m}{n_s}\sin\theta_i\right). \tag{1.142}$$

Fig. 1.23: Monocapa desordenada de partículas de radio *a* soportada en un sustrato con índice de refracción n_s , e inmersas en una matriz con índice de refracción n_m , en configuración de incidencia interna. La onda inicial, con campo eléctrico \mathbf{E}_i (flecha verde), incide con un ángulo θ_i sobre la interfaz sustrato-matriz respecto a la normal, $\hat{\mathbf{e}}_z$. El plano efectivo asociado a la monocapa (z = a) se indica con una línea punteada rosa. Se indican las reflexiones y transmisiones coherentes debidas a la monocapa de partículas junto a las reflexiones y transmisiones asociadas a la interfaz matriz-sustrato.

En la Fig. 1.23 se ilustra el proceso que sufre el campo incidente: los puntos (1) y (2) indican la reflexión $(r_{sm}\mathbf{E}_i)$ y transmisión $(t_{sm}e^{i\beta_2}\mathbf{E}_i)$ debidos a la interfaz sustrato-matriz. Al igual que en el caso de incidencia externa, se agrega una fase debida al recorrido de la onda entre la interfaz sustrato-matriz y el plano efectivo asociado a la monocapa (línea rosa punteada en la Fig. 1.23). En el caso de incidencia interna $\beta_2 = ak_0n_m \cos\theta_t$. La onda transmitida hacia la matriz incide sobre el plano asociado a la monocapa, por tanto se refleja $(r_{coh}t_{sm}e^{2i\beta_2}\mathbf{E}_i, (3)$ en la Fig. 1.23) y transmite $(t_{coh}t_{sm}e^{i\beta_2}\mathbf{E}_i, (4)$ en la Fig. 1.23) de acuerdo al CSM [Ecs. (1.138a) y (1.138b), respectivamente]. El punto (5) indica la transmisión $(t_{ms}r_{coh}t_{sm}e^{2i\beta_2}\mathbf{E}_i)$ hacia el sustrato de la onda en (3). Asimismo, se produce una reflexión debida a la interfaz matriz–sustrato $(r_{ms}r_{coh}t_{sm}e^{3i\beta_2}\mathbf{E}_i, (6)$ en la Fig. 1.23). Las múltiples reflexiones continúan produciéndose entre el plano z = a y la interfaz matriz–sustrato de forma infinita. Al considerar todas las ondas reflejadas y transmitidas hacia el sustrato, se obtiene que el coeficiente de amplitud de reflexión es [48]

$$r = r_{sm}(\theta_{i}) + t_{ms}(\theta_{t})r_{coh}(\theta_{t})t_{sm}(\theta_{i})e^{2i\beta_{2}} + t_{ms}(\theta_{t})r_{ms}(\theta_{t})r_{coh}^{2}(\theta_{t})t_{sm}(\theta_{i})e^{4i\beta_{2}} + \cdots + t_{ms}(\theta_{t})r_{ms}^{2}(\theta_{t})r_{coh}^{3}(\theta_{t})t_{sm}(\theta_{i})e^{6i\beta_{2}} + t_{ms}(\theta_{t})r_{ms}^{3}(\theta_{t})r_{coh}^{4}(\theta_{t})t_{sm}(\theta_{i})e^{8i\beta_{2}} \cdots = r_{sm} + t_{ms}r_{coh}t_{sm}e^{2i\beta_{2}}\left(1 + r_{ms}r_{coh}e^{2i\beta_{2}} + r_{ms}^{2}r_{coh}^{2}e^{4i\beta_{2}} + \cdots\right)$$
(1.143)
$$= r_{sm} + t_{ms}r_{coh}t_{sm}e^{2i\beta_{2}}\sum_{n=0}^{\infty}(r_{ms}r_{coh}e^{2i\beta_{2}})^{n} = r_{sm} + \frac{t_{ms}r_{coh}t_{sm}e^{2i\beta_{2}}}{1 - r_{ms}r_{coh}e^{2i\beta_{2}}},$$

en donde se considera que $||r_{ms}r_{coh}e^{2i\beta_2}|| < 1$ para utilizar la serie geométrica. Por otra parte, a través de las relaciones $r_{sm}(\theta_i) = -r_{ms}(\theta_t)$, $t_{ms}(\theta_t) = 1 + r_{ms}(\theta_t)$ y $t_{sm}(\theta_i) = 1 + r_{sm}(\theta_i)$ [48], la expressión en

la Ec. (1.143) se reescribe como [47]

$$r = \frac{r_{sm}(\theta_i) + r_{coh}(\theta_t)e^{2i\beta_2}}{1 + r_{sm}(\theta_i)r_{coh}(\theta_t)e^{2i\beta_2}}.$$
(1.144)

A partir de los campos esparcidos hacia la matriz, se obtiene que el coeficiente de transmisión del sistema está dado por

$$t = t_{coh}(\theta_t)t_{sm}(\theta_i)e^{i\beta_2} + t_{coh}(\theta_t)r_{ms}(\theta_t)r_{coh}(\theta_t)t_{sm}(\theta_i)e^{3i\beta_2} + t_{coh}(\theta_t)r_{ms}^2(\theta_t)r_{coh}^2(\theta_t)t_{sm}(\theta_i)e^{5i\beta_2}\cdots$$

$$= t_{coh}t_{sm}e^{i\beta_2}\left(1 + r_{ms}r_{coh}e^{2i\beta_2} + r_{ms}^2r_{coh}^2e^{4i\beta_2} + \cdots\right) = t_{coh}t_{sm}e^{i\beta_2}\sum_{n=0}^{\infty}\left(r_{ms}r_{coh}e^{2i\beta_2}\right)^n.$$
(1.145)

Considerando que $||r_{ms}r_{coh}e^{2i\beta_2}|| < 1$ y la forma de la serie geométrica, el coeficiente de transmisión asociado al sistema para incidencia interna se escribe como

$$t = \frac{t_{coh}(\theta_t)t_{sm}(\theta_i)e^{i\beta_2}}{1 - r_{coh}(\theta_t)r_{ms}(\theta_i)e^{2i\beta_2}}.$$
(1.146)

Capítulo 2

RESULTADOS

1 RESPUESTA ÓPTICA DE PARTÍCULA AISLADA

En esta sección se analiza la respuesta óptica de una partícula esférica individual, inmersa en una matriz con índice de refracción n_m , a partir de la teoría de Mie. Para realizar este estudio se consideran cuatro materiales: silicio (Si), carburo de silicio (SiC), oro (Au) y bismuto (Bi). Los primeros dos materiales son considerados como dieléctricos del alto índice de refracción en la región visible del espectro, y los dos últimos son considerados como materiales plasmónicos. El rango de longitudes de onda considerado abarca desde 300 a 1,000 nm. Para cada uno de los materiales seleccionados se calculan las eficiencias de extinción, absorción y esparcimiento, en función de la longitud de onda incidente y del radio de la partícula (entre 5 y 150 nm). Asimismo, se identifican las posibles resonancias y la contribución de cada multipolo excitado en la partícula esférica. A partir de los resultados obtenidos para las eficiencias, se centra el análisis en un tamaño específico de partícula con el propósito de determinar si se obtienen efectos tipo Kerker. Para los materiales dieléctricos se elige un radio de partícula donde la respuesta óptica esté dominada por las resonancias dipolares, tanto eléctrica como magnética, de tal forma que se puedan obtener las condiciones de Kerker originales. De forma complementaria, en los materiales con respuesta metálica se busca la aparición de efectos tipo Kerker generalizados al inducir tanto el dipolo eléctrico como el cuadrupolo eléctrico. En forma paralela, se realiza un análisis de la influencia del índice de refracción de la matriz en el comportamiento de las resonancias excitadas en la partícula.

1.1 Partículas dieléctricas de alto índice de refracción

1.1.1 Silicio

El silicio es un material semiconductor ampliamente estudiado en la nanofotónica [86]. Este material se comporta como un dieléctrico de alto índice de refracción y tiene la particularidad de presentar baja absorción dentro del rango visible e infrarrojo. En la Fig. 2.1(a) se muestran datos experimentales del índice de refracción del silicio cristalino extraídos de la referencia [87], en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Es importante resaltar que en la referencia [87] se recopilan datos experimentales del índice de refracción de distintos materiales, y en general para cada uno se recopilan los datos medidos en diferentes experimentos. En el caso particular de silicio, dentro del rango de longitudes de onda 200–2, 500 nm, se consideran datos de tres publicaciones. En la Fig. 2.1(a) se identifican con cuadros los datos obtenidos en la referencia [88], con círculos los obtenidos de la referencia [89] y con triángulos aquellos pertenecientes a la referencia [90]. La parte real del índice de refracción ($\operatorname{Re}\{N\}$) se indica con rojo, mientras que la imaginaria ($\operatorname{Im}\{N\}$) se identifica con azul. Dentro del rango de longitudes de onda desde 800 hasta 2,500 nm, el índice de refracción es prácticamente un valor real constante (~ 3.5). Para longitudes de onda menores a 800 nm, aumenta el valor de la parte



Fig. 2.1: (a) Índice de refracción del silicio en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Los datos experimentales (puntos) se obtuvieron de las referencias: [88] (cuadros), [89] (círculos) y [90] (triángulos). (b) Función dieléctrica del silicio calculada a partir de los datos experimentales del índice de refracción, en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Los símbolos corresponden a las mismas referencias que en (a). Las partes reales ($\operatorname{Re}\{N\}$, $\operatorname{Re}\{\epsilon\}$) tanto del índice de refracción como de la función dieléctrica se indica con rojo, mientras que las imaginarias ($\operatorname{Im}\{N\}$, $\operatorname{Im}\{\epsilon\}$) con azul. En ambas gráficas las líneas continuas son interpolaciones hechas a partir de los datos experimentales.

real del índice de refracción llegando a un máximo ~ 7.5, para después descender a 1.5 en $\lambda = 200$ nm. Debajo de $\lambda = 800$ nm, la parte imaginaria del índice de refracción es distinta de cero y su magnitud es comparable a la de la parte real. A partir de los datos del índice de refracción se calcula la función dieléctrica del material, que se muestran en la Fig. 2.1(b) en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Nuevamente el rojo identifica a la parte real (Re{ ϵ }) y el azul a la imaginaria (Im{ ϵ }). Para longitudes de onda entre 800 nm y 2,500 nm, la parte real de la función dieléctrica se mantiene constante alrededor de ~ 12.25 y la parte imaginaria es cercana cero. Para longitudes de onda menores a 800 nm, la función dieléctrica presenta tanto parte real como imaginaria diferentes de cero. La parte real aumenta su valor conforme decrece la longitud de onda, manteniéndose positiva hasta $\lambda \sim 300$ nm y para $\lambda < 300$ nm cambia su signo, presentando un comportamiento metálico.

A partir del índice de refracción del silicio en bulto se calcula la eficiencia de extinción [Fig. 2.2(a)] en función del radio de la partícula (a) y de la longitud de onda incidente (λ). Se estudia el rango entre 5 y 150 nm para el radio y se consideran valores para la longitud de onda entre $\lambda = 300$ nm y $\lambda = 1,000$ nm. Además, se considera que la partícula de silicio está inmersa en una matriz de aire ($n_m = 1$). En la Fig. 2.2(a) se aprecian al menos cuatro resonancias dentro de los rangos seleccionados. Las resonancias corresponden al dipolo eléctrico (DE), dipolo magnético (DM), cuadrupolo eléctrico (CE) y cuadrupolo magnético (CM), denotadas por a_1 , b_1 , a_2 y b_2 , respectivamente [ver Fig. 2.2(a)]. La resonancia de mayor magnitud corresponde al DM [señalada como b_1 en la Fig. 2.2(a)], siendo la primera que aparece a radios de partícula más pequeños para un valor constante de la longitud de onda. Cabe resaltar que la resonancia DM aparece para un rango de longitudes de onda amplio (350–1,000 nm), por ello, tal resonancia puede ser sintonizada al variar el radio de la partícula. Asimismo, se identifica una resonancia que corresponde al DE, señalada como a_1 en la Fig. 2.2(a) y que presenta un ancho mayor respecto a la del DM, sobreponiéndose a la resonancia del CM, por lo que se grafica su contribución individual en la Fig. 2.2(b). La resonancia del DE muestra una magnitud considerable para radios mayores a 40 nm y, para un radio fijo (por ejemplo a = 60 nm, línea vertical punteada en la Fig. 2.2), aparece a longitudes de onda menores a la necesaria para excitar al DM. Por ello, en una partícula esférica de silicio, se requiere energías menores para inducir al DM respecto a la energía necesaria para excitar al DE. Después de la resonancia del DE, se identifica la resonancia asociada al CM, señalada como b_2 en la Fig. 2.2(a), la cual es más angosta comparada con las resonancias asociadas al DM y al DE. Si bien la contribución del CM



Fig. 2.2: (a) Eficiencia de extinción de una partícula esférica de silicio inmersa en una matriz de aire $(n_m = 1)$, en función del radio de la partícula (a) y de la longitud de onda incidente (λ) . Se indican los coeficientes de Mie asociados a las resonancias presentes. En (b) se muestra la contribución individual del coeficiente a_1 a la eficiencia de extinción. (c) Eficiencia de absorción asociada a la partícula de silicio en función del radio de la partícula y de la longitud de onda, inmersa en una matriz de aire $(n_m = 1)$. La eficiencia de esparcimiento, en función del radio de la partícula y de la longitud de onda, se muestra para diferentes matrices: en (d) se considera una matriz de aire $(n_m = 1)$, en (e) de agua $(n_m = 1.33)$ y en (f) de vidrio $(n_m = 1.5)$. La línea vertical punteada blanca corresponde a a = 60 nm.

está presente para todos los radios de la partícula, su resonancia aparece bien definida para radios mayores a 80 nm. Por último, se identifica la resonancia del CE, señalada como a_2 en la Fig. 2.2(a), la cual aparece para radios mayores a 90 nm. Otra característica importante de todas las resonancias identificadas es el corrimiento hacia el rojo al aumentar el radio de la partícula.

La eficiencia de absorción en función del radio y de la longitud de onda asociada a la partícula de silicio embebida en aire se muestra en la Fig. 2.2(c). Se observa que la eficiencia de absorción es máxima para longitudes de onda menores a $\lambda = 700$ nm, alcanzando su valor máximo alrededor de a = 45 nm. Para radios menores a 20 nm, la eficiencia de absorción se aproxima a cero. El máximo de la eficiencia de absorción dentro de los rangos estudiados es aproximadamente 2.5 veces menor al máximo de la eficiencia de extinción, por lo que es evidente que predominan los efectos de esparcimiento sobre los de absorción. En la Fig. 2.2(d) se muestra la eficiencia de esparcimiento de la partícula de silicio embebida en una matriz de aire. De la Figura se puede observar que se obtienen las mismas resonancias ya identificadas en la Fig. 2.2(a). Nuevamente, la resonancia proveniente del DM corresponde a la de mayor magnitud dentro de los rangos estudiados. Con el fin de comparar el comportamiento de las resonancias para matrices con diferentes índices de refracción, se calculó la eficiencia de esparcimiento considerando una matriz de agua $(n_m \approx 1.33)$ [Fig. 2.2(e)] y una de vidrio $(n_m \approx 1.5)$ [Fig. 2.2(f)]. Como se puede observar, la eficiencia

de esparcimiento disminuye al incrementar el valor de n_m . Además, se presenta un ensanchamiento de las resonancias, siendo el más evidente el de las resonancias del DM y el CM. Es interesante notar en la Fig. 2.2(f) que las resonancias asociadas al DM y CM tienen magnitudes comparables entre sí para radios $a \sim 110$ nm, donde ambas resonancias dominan la respuesta de la partícula.

Con el propósito de analizar con mayor detenimiento los cambios en la eficiencia de esparcimiento debidos a la variación del índice de refracción de la matriz, se grafican las contribuciones de cada uno de los coeficientes a_1 [Fig. 2.3(a)], a_2 [Fig. 2.3(b)], b_1 [Fig. 2.3(c)] y b_2 [Fig. 2.3(d)] para una partícula de silicio de radio 60 nm. El índice de refracción de la matriz se varía desde $n_m = 1$ a 1.55. El color de cada línea representa un valor distinto de n_m , donde el amarillo corresponde a $n_m = 1$ y el azul a $n_m = 1.55$. Las líneas punteadas indican la longitud de onda alrededor de la cual se localiza la resonancia, para $n_m = 1$ (línea punteada amarilla) y $n_m = 1.55$ (línea punteada azul). Como se puede observar, para cada multipolo se obtuvieron corrimientos de las resonancias hacia longitudes de onda más largas y cambios en la magnitud. En el caso del DE [ver Fig. 2.3(a)], al incrementar el índice de refracción de la matriz, la resonancia presenta un corrimiento hacia el rojo de ~ 20 nm. La magnitud de la resonancia asociada al DE presenta un máximo que aumenta al incrementar el valor de n_m hasta alcanzar el máximo valor en $n_m = 1.22$. En cambio, para el CE [Fig. 2.3(b)] la magnitud crece de manera monótona conforme aumenta el índice de refracción de la matriz alcanzando un valor máximo de 0.35 para $n_m = 1.55$. En este caso, el corrimiento de la resonancia también se da hacia el rojo y se estima que es de 4.9 nm. En lo que respecta al DM, se observa un corrimiento hacia el rojo de ~ 6.5 nm [ver Fig. 2.3(c)], mientras que para el CM el corrimiento hacia el rojo es de ~ 4.1 nm [ver Fig. 2.3(d)]. Tanto para el DM como el DE, la magnitud de la resonancia disminuye al incrementar el índice de refracción de la matriz. En cambio, para los cuadrupolos la magnitud aumenta. En resumen, un cambio en el índice de refracción de la matriz ocasiona cambios en las magnitudes de las eficiencias y corrimientos hacia el rojo conforme crece el índice de refracción de la matriz.



Fig. 2.3: Contribuciones individuales a la eficiencia de esparcimiento calculadas para los coeficientes (**a**) a_1 , (**b**) a_2 , (**c**) b_1 y (**d**) b_2 , en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior), considerando una partícula esférica de silicio de radio 60 nm. El índice de refracción de la matriz se varía entre 1 (línea amarilla) y 1.55 (línea azul). Las líneas verticales punteadas amarilla y azul indican la posición de las resonancias para $n_m = 1$ y $n_m = 1.55$, respectivamente.

Se eligió estudiar la partícula de radio a = 60 nm, puesto que en la Fig. 2.2(a) se muestra que las resonancias de mayor magnitud son las dipolares y, por tanto, dominan la respuesta óptica de la partícula. Además, ambas resonancias se presentan dentro del rango visible. Por otro lado, la absorción para a = 60 nm presenta una magnitud máxima aproximada de 2.6 alrededor de $\lambda = 429$ nm [ver Fig. 2.2(c)]. Al comparar con la eficiencia de esparcimiento alrededor de la misma longitud de onda, la eficiencia de esparcimiento es 1.6 veces menor a la de absorción. Sin embargo, para longitudes de onda mayores, domina el esparcimiento. En particular, en su valor máximo, cercano a 6.4 para a = 60 nm alrededor de $\lambda = 521$ nm, la absorción es 2.6 veces menor al esparcimiento. Por tanto, la extinción debida a la partícula se debe principalmente al esparcimiento. Utilizando la partícula de 60 nm de radio, se realiza un análisis con el propósito de determinar si se presentan efectos tipo Kerker. Para ello, se estudia la eficiencia de esparcimiento frontal [línea roja en la gráfica superior en la Fig. 2.4(a)] y retroesparcimiento [línea negra en la gráfica superior en la Fig. 2.4(a)]. Asimismo se grafican las contribuciones individuales de cada uno de los coeficientes de Mie $(a_1, a_2, b_1 y b_2)$ a las eficiencias de esparcimiento frontal y retroesparcimiento. Cabe mencionar que, a partir de las Ecs. (1.91) y (1.92), se obtiene que las contribuciones individuales a cada una de las eficiencias son:

$$Q_{scat}^{\text{back}}(a_n) = Q_{scat}^{\text{forw}}(a_n) = \frac{1}{4\pi x^2} \left| (2n+1)a_n \right|^2, \qquad (2.1a)$$

$$Q_{scat}^{\text{back}}(b_n) = Q_{scat}^{\text{forw}}(b_n) = \frac{1}{4\pi x^2} \left| (2n+1)b_n \right|^2.$$
(2.1b)

Por tanto, la contribución individual de un coeficiente es igual para cualquiera de las eficiencias. En la gráfica central de la Fig. 2.4(a) se muestran las contribuciones de a_1 (línea azul), b_1 (línea punteada azul), a_2 (línea naranja) y b_2 (línea punteada naranja). Es importante mencionar que los cuadrupolos son al menos 50 veces menores que el DE [ver escala derecha en naranja en la gráfica central de la Fig. 2.4(a)], cuya magnitud máxima es a su vez ~ 1.7 veces menor a la del DM. Por ende, las resonancias de mayor contribución en las eficiencias de esparcimiento frontal y retroesparcimiento se asocian a la respuesta dipolar magnética, que aparece alrededor de $\lambda = 521$ nm, seguida por la resonancia dipolar eléctrica, localizada alrededor de $\lambda = 447$ nm. Dentro del rango de longitudes de onda estudiado se aprecia un mínimo del retroesparcimiento alrededor de $\lambda = 559$ nm [línea vertical punteada morada en la Fig. 2.4(a)]. cercano a donde las contribuciones de ambos dipolos es igual. Por otra parte, se aprecia un mínimo local del esparcimiento frontal en $\lambda = 487$ nm (línea vertical punteada cian), que también corresponde al punto donde las magnitudes de las contribuciones de los dipolos son casi iguales. En la gráfica inferior de la Fig. 2.4(a) se grafica la diferencia de fase relativa entre ambos dipolos (línea negra), donde se aprecia un mínimo único cercano a $\lambda \approx 570$ nm. Este mínimo denota que ambos dipolos están oscilando en fase y por tanto se debe satisfacer la primera condición de Kerker. Sin embargo, en la figura superior en la Fig. 2.4(a) se observa que el mínimo de Q_{scat}^{back} está corrido ~ 11 nm hacia el azul respecto al mínimo de la diferencia de fase. Este corrimiento se debe a que no se consideraron en la diferencia de fase las contribuciones de multipolos de mayor orden a los dipolares. Por ejemplo, si se consideran también los cuadrupolos (eléctrico y magnético), la condición para anular el retroesparcimiento es $3(a_1 - b_1) = 5(a_2 - b_2)$ [ver Ec. (1.91)], y la diferencia de fase relativa se muestran en la gráfica inferior de la fig. 2.4(a) (línea morada y escala derecha). El mínimo que se obtiene aparece para $\lambda \approx 565$ nm, que es cercano al mínimo de Q_{scat}^{back} Aunque las contribuciones de los cuadrupolos son pequeñas respecto a las dipolares, al considerarlos dentro de las fases hacen una diferencia notable.

Con el propósito de verificar la presencia de efectos de interferencia multipolar, se calcula la sección transversal diferencial de esparcimiento para tres longitudes de onda de interés: $\lambda = 559$ nm [Fig. 2.4(b)], $\lambda = 487$ nm [Fig. 2.4(c)] y $\lambda = 527$ nm [Fig. 2.4(d)]. Los patrones de radiación en 3D se muestran a la izquierda de las gráficas polares, que corresponden a cortes en los planos $\phi = 0$ (línea continua azul) y $\phi = \pi/2$ (línea continua naranja). Para caracterizar la direccionalidad obtenida en los patrones de radiación se utiliza el ancho del lóbulo principal. Para ello, se cuantifica el ancho del haz a potencia media (*half-power beamwidth*, HPB, en inglés) [30]. El valor del HPB para los patrones en los planos

CAPÍTULO 2 • RESULTADOS



Fig. 2.4: (a) Eficiencias de esparcimiento frontal (línea roja) y de retroesparcimiento (línea negra) en función de la longitud de onda y la energía, para una partícula esférica de silicio de radio 60 nm inmersa en aire. Asimismo, en la gráfica de en medio, se muestran las contribuciones individuales de los coeficientes de Mie: a_1 (línea azul), a_2 (línea naranja), b_1 (línea azul punteada) y b_2 (línea naranja punteada), donde la escala para a_2 y b_2 está a la derecha de la gráfica. En la figura inferior, se grafica la diferencia de fase relativa de los dipolos (línea negra) y para la condición $3(a_1 - b_1) = 5(a_2 - b_2)$ (línea morada, escala a la derecha). Las líneas punteadas verticales indican los valores de longitud de onda $\lambda = 487$ nm (cian), $\lambda = 527$ nm (verde) y $\lambda = 559$ nm (magenta). Los cálculos del patrón de radiación se presentan en gráficas 3D y gráficas polares con cortes en los planos $\phi = 0$ (línea azul) y $\phi = \pi/2$ (línea naranja) para (b) $\lambda = 559$ nm, (c) $\lambda = 487$ nm y (d) $\lambda = 527$ nm. Se asume que el vector de onda incidente es paralelo al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$, mientras que el campo eléctrico \mathbf{E}_i es paralelo a $\hat{\mathbf{e}}_x$. Las líneas punteadas azul y naranjada señalan la apertura de α_1 y α_2 .

 $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$ se denota con α_1 y α_2 , respectivamente. Para $\lambda = 559$ nm (mínimo de la eficiencia de retroesparcimiento) se obtiene un patrón de radiación en la dirección frontal, por tanto se logra anular el retroesparcimiento. Alrededor de $\lambda = 559$ nm, las contribuciones mayores provienen de ambos dipolos. En las gráficas polares se aprecia que sólo aparece un lóbulo y tiene una forma casi circular. Los valores para α_1 y α_2 se estiman en 123.8° y 130.6°, respectivamente. Por ello, se concluye que para $\lambda = 559$ nm existe interferencia entre los dipolos y se obtiene la primera condición de Kerker. En contraste, a $\lambda = 487$ nm se minimiza el esparcimiento frontal [ver Fig. 2.4(c)]. En el plano $\phi = 0$ se observa una contribución que alcanza su máximo en $\theta = 0$, con magnitud aproximadamente 5 veces menor a la magnitud del esparcimiento en $\theta = \pi$, dirección en donde se alcanza el punto máximo del patrón de radiación. Para el plano $\phi = \pi/2$, el esparcimiento frontal también es menor al retroesparcimiento. Además, se estima que $\alpha_1 = 133.2^\circ$ y $\alpha_2 = 135^\circ$. La forma del patrón de radiación muestra que para $\lambda = 487$ nm se obtiene la segunda condición de Kerker. Por tanto, para la misma partícula se logran las dos condiciones de Kerker para dos longitudes de onda distintas. Adicionalmente se grafica el patrón de radiación para $\lambda = 527$ nm (máximo de la eficiencia de esparcimiento frontal), para el cual se

aprecia que la mayor parte del esparcimiento se da en el hemisferio $\theta \in [0, \pi/2] \cup [3\pi/2, 2\pi)$ [ver Fig. 2.4(d)]. Se estima que el esparcimiento en la dirección frontal es aproximadamente tres veces mayor al retroesparcimiento. Debido a que en la distribución angular del patrón de radiación sobre el plano $\phi = 0$ no se discrimina un lóbulo bien definido, sólo se estima que $\alpha_2 = 105.4^\circ$. Se concluye que sólo para $\lambda = 559$ nm existe esparcimiento unidireccional.

1.1.2 Carburo de silicio

El carburo de silicio (SiC) es un material dieléctrico considerado de alto índice de refracción dentro del rango de frecuencias visible e infrarrojo cercano. Por ello, las partículas compuestas de SiC tienen el potencial de presentar resonancias de Mie magnéticas dentro del rango visible y ser una alternativa al silicio. En la Fig. 2.5(a) se presentan los datos experimentales del índice de refracción obtenidos de la referencia [87], para el rango de longitudes de onda 200-2, 500 nm. El índice de refracción se muestra en función de la longitud de onda (eje inferior) y la energía (eje superior). Dentro de la referencia [87], se tienen datos provenientes de cinco publicaciones: los datos de la referencia [91] se indican con estrellas, con puntos los correspondientes a la referencia [92], los datos de la referencia [93] con triángulos, y, por último, con rombos y cuadros los provenientes de las referencias [94] y [95], respectivamente. La parte real e imaginaria del índice se indican con rojo y azul, respectivamente. Las líneas continuas en la Fig. 2.5(a) son interpolaciones hechas a partir de los datos experimentales. Para longitudes de onda mayores a $\lambda = 500$ nm, el índice de refracción del SiC presenta una parte prácticamente constante alrededor de ~ 2.6 , mientras que la parte imaginaria se aproxima a cero. En contraste, para longitudes de onda menores a 500 nm, el valor de $Re\{N\}$ aumenta en magnitud alcanzando su valor máximo alrededor de 200 nm. Por otra parte, dentro del rango espectral 300–500 nm, $Im\{N\}$ es distinto a cero, aunque su magnitud no excede a la unidad. En la Fig. 2.5(b) se presenta la función dieléctrica calculada a partir de los datos experimentales del índice de refracción. La parte imaginaria de la función dieléctrica es aproximadamente cero para longitudes de onda entre $\lambda = 500$ nm y $\lambda = 2,500$ nm. Por tanto, el material no presenta absorción. Asimismo, la parte real de la función de dieléctrica se mantiene constante alrededor de ~ 6.8 .



Fig. 2.5: (a) Índice de refracción del SiC en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Los datos experimentales se obtuvieron de las referencias: [91] (estrellas), [92] (puntos), [93] (triángulos), [94] (rombos) y [95] (cuadros). (b) Función dieléctrica del SiC calculada a partir de los datos experimentales del índice de refracción, en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Los símbolos corresponden a las mismas referencias que en (a). Las partes reales ($\operatorname{Re}\{N\}$, $\operatorname{Re}\{\epsilon\}$) tanto del índice de refracción como de la función dieléctrica se indica con rojo, mientras que las imaginarias ($\operatorname{Im}\{N\}$, $\operatorname{Im}\{\epsilon\}$) con azul. En ambas gráficas las líneas continuas son interpolaciones hechas a partir de los datos experimentales.

CAPÍTULO 2 • RESULTADOS

En la Fig. 2.6(a) se muestra la eficiencia de extinción en función del radio de la partícula (5–150 nm) y de la longitud de onda incidente (300–1,000 nm) asociada a una partícula esférica de SiC, embebida en una matriz de aire. Una característica notable es que la magnitud de la eficiencia de extinción comienza a ser relevante para radios mayores a 40 nm. Dentro de los rangos estudiados, se identificaron resonancias provenientes del DE (a_1) , DM (b_1) , OE (a_2) v OM (b_2) . En la Fig. 2.6(a) se señalan las posiciones de las resonancias identificadas. Se observa que las cuatro resonancias no se encuentran bien definidas como en el caso de la partícula de silicio [Fig. 2.2]. Es decir, son más anchas espectralmente y pueden traslaparse. Con el fin de identificar claramente la posición y comportamiento, en las Figs. 2.6(b-e), se grafican las contribuciones individuales de cada multipolo. Para el DE [Fig. 2.6(b)] se obtiene una resonancia ancha espectralmente. En particular, para a = 90 nm [línea blanca punteada en las Figs. 2.6], la contribución del DE es mayor a 1.5 desde $\lambda = 340$ nm a $\lambda = 640$ nm, aproximadamente. Además, la resonancia muestra valores relevantes para radios mayores a 40 nm. En contraste, la contribución del QE [Fig. 2.6(c)] es relevante para radios mayores a ~ 78 nm y, en comparación al DE, es más angosta. De forma similar, para las resonancias magnéticas, se obtiene que el DM [Fig. 2.6(d)] presenta una resonancia más ancha respecto al CM [Fig. 2.6(e)]. Por otra parte, se obtiene que la contribución del DM es relevante para los radios de partícula mayores a 45 nm, mientras que la del CM lo es para radios mayores a 70 nm. Análogamente al caso de partículas de silicio, para un radio fijo, por ejemplo a = 90 nm [línea punteada blanca en las Figs. 2.6], la resonancia del DM aparece para las longitudes de onda más largas, es decir, para energías menores, seguida por el DE, el CM y, por último, el CE. También se obtiene que la magnitud



Fig. 2.6: (a) Eficiencia de extinción de una partícula de carburo de silicio esférica embebida dentro de una matriz de aire $(n_m = 1)$, en función del radio de la partícula y de la longitud de onda incidente. Se indican los coeficientes de Mie asociados a las resonancias y se grafican las contribuciones individuales de los coeficientes (b) a_1 , (c) a_2 , (d) b_1 y (e) b_2 a la eficiencia de extinción. (f) Eficiencia de absorción en función del radio y de longitud de onda para una partícula de SiC inmersa en aire. Las líneas verticales blancas indican la posición de a = 90 nm.

máxima alcanzada por la resonancia del DE dentro de los rangos estudiados es 1.6 veces menor a la magnitud máxima alcanzada por la resonancia del DM. Al analizar las magnitudes máximas obtenidas en las resonancias cuadrupolares, se concluye que el valor máximo del CM es 1.25 y 1.4 veces mayor a los máximos del DE y del CE, respectivamente. Sin embargo, el CM es 1.2 veces menor al máximo del DM. Es interesante notar que para radios mayores a 95 nm, el CM presenta una contribución mayor a la del DE. Por tanto, la respuesta inducida sobre una partícula de SiC inmersa en aire está dominada principalmente por las contribuciones del DM y del CM. Por último, cabe mencionar que las resonancias presentan un corrimiento hacia el rojo al incrementar el radio de la partícula.

La eficiencia de absorción asociada a la partícula se muestra en la Fig. 2.6(f) en función de la longitud de onda y del radio. La absorción alcanza su valor máximo (2) dentro del intervalo de longitud de onda 300-420 nm. Para valores de λ mayores a 420 nm, la eficiencia de absorción se aproxima a cero. Cabe resaltar que la función dieléctrica del SiC [Fig. 2.5(b)] presenta una parte imaginaria distinta a cero para longitudes de onda menores a $\lambda = 500$ nm, por tanto, el material presenta absorción y, por ello, el cálculo en la Fig. 2.6(f) es congruente. La magnitud máxima obtenida para la eficiencia de absorción es 3.7 veces menor al máximo de la eficiencia de extinción. Es interesante hacer notar que para radios menores a 40 nm, la absorción se aproxima a cero con longitudes de onda mayores a $\lambda = 400$ nm [ver Fig. 2.6(f)].

La eficiencia de esparcimiento asociada a la partícula de SiC se calcula en función del radio y la longitud de onda para tres valores distintos del índice de refracción de la matriz. Se utilizan las matrices de aire $n_m = 1$ [Fig. 2.7(a)], agua $n_m = 1.33$ [Fig. 2.7(b)] y vidrio $n_m = 1.5$ [Fig. 2.7(c)]. En el caso de la partícula inmersa en aire, se obtienen las resonancias ya identificadas para la eficiencia de extinción [Fig. 2.6(a)]. Nuevamente, la resonancia DM es la de mayor magnitud. Al incrementar el valor de n_m a 1.33, la magnitud máxima obtenida es aproximadamente 1.2 veces menor al máximo obtenido en aire. Análogamente, el esparcimiento de la partícula en la matriz de vidrio es ~ 1.4 veces menor al máximo del esparcimiento en la matriz de aire. En las matrices de agua y vidrio, la magnitud de la resonancia del DM decrece y pierde definición respecto a las resonancias cuadrupolares, por lo que en las Figs. 2.7(b) y (c), las resonancias dipolares dejan de ser distinguibles.



Fig. 2.7: Eficiencia de esparcimiento de una partícula de carburo de silicio esférica aislada en función del radio y la longitud de onda incidente. Se considera que la partícula está inmersa dentro de: (a) una matriz de aire $(n_m = 1)$, (b) una matriz de agua $(n_m = 1.33)$ y (c) una matriz de vidrio $(n_m = 1.5)$. Se indican los coeficientes de Mie que muestran resonancias dentro de los rangos de radio y longitud de onda. La línea vertical punteada blanca señala la posición de a = 90 nm.

Es interesante notar en la Fig. 2.7 la aparición de las resonancias provenientes de los octupolos eléctrico (OE) y magnético (OM). En caso de la matriz de aire, sus contribuciones son menores al resto de los multipolos y se presentan sólo para radios mayores a 120 nm. Sin embargo, el aumento del índice de refracción de la matriz propicia que su magnitud aumente y sea comparable al resto de las resonancias

CAPÍTULO 2 • RESULTADOS

presentes. Por tanto, en las Figs. 2.7(b) y 2.7(c), dominan la respuesta óptica los octupolos junto a las resonancias cuadrupolares. Es preciso destacar que el aumento del índice de refracción de la matriz también causa que las resonancias se superpongan entre ellas. Por ello, para la matriz de agua y vidrio, las resonancias identificadas corresponden a resonancias de al menos dos multipolos. La superposición espectral de las resonancias propicia la aparición de los efectos tipo Kerker. Potencialmente, en una partícula de SiC pueden lograrse no sólo las condiciones de Kerker originales sino también efectos generalizados a partir de las resonancias cuadrupolares y octupolares, al elegirse los parámetros de radio, longitud de onda y n_m adecuados.

A continuación se estudiarán los cambios en las resonancias debidos al índice de refracción de la matriz para la partícula de SiC de radio 90 nm. De acuerdo a los resultados anteriores, para dicho tamaño de partícula, las resonancias de mayor contribución son las dipolares y cuadrupolares (ver líneas verticales punteadas blancas en las Figs. 2.6 y 2.7). En la Fig. 2.8 se presentan las contribuciones del DE [Fig. 2.8(a)], CE [Fig. 2.8(b)], DM [Fig. 2.8(c)] y CM [Fig. 2.8(d)] a la eficiencia de esparcimiento para la partícula de SiC de radio 90 nm. Se utilizan diferentes valores de n_m , entre 1 (línea amarilla en las Figs. 2.8) y 1.55 (línea azul en las Figs. 2.8). En el caso de la resonancia del DE, se obtiene un corrimiento de 11.4 nm hacia el rojo al aumentar el índice de la matriz. Se observa, además, que la magnitud del máximo se reduce aproximadamente por un factor de tres y se pierde la definición de la resonancia. Por otro lado, la resonancia del CE [Fig. 2.8(b)] muestra un corrimiento de aproximadamente 31.5 nm hacia el rojo; la resonancia alcanza su valor máximo en $n_m = 1.22$. En cambio, la resonancia del DM [Fig. 2.8(c)] muestra una disminución monótona de su magnitud al aumentar el índice de refracción de la matriz. La magnitud de la resonancia con $n_m = 1.55$ disminuye tres veces, aproximadamente, respecto al máximo obtenido con $n_m = 1$. En contraste al resto de las resonancias, el corrimiento de 22.6 nm de la resonancia DM se da hacia el azul. Por último, el CM [Fig. 2.8(d)] alcanza su máximo en $n_m = 1.33$ y se observa un corrimiento al rojo de 9.4 nm. De acuerdo a los resultados anteriores, una partícula de SiC de radio 90 nm inmersa en aire muestra que la respuesta está dominada por las resonancias de los DE y DM, localizadas alrededor de $\lambda = 424$ nm y $\lambda = 507$ nm, respectivamente. Además, en la Fig. 2.6(f) se muestra que la



Fig. 2.8: Contribuciones individuales a la eficiencia de esparcimiento calculadas para los coeficientes (**a**) a_1 , (**b**) a_2 , (**c**) b_1 y (**d**) b_2 , en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior), considerando una partícula de carburo de silicio esférica de radio 90 nm. El índice de refracción de la matriz se varía entre 1 (línea amarilla) y 1.55 (línea azul). Las líneas verticales punteadas amarilla y azul indican la posición de las resonancias para $n_m = 1$ y $n_m = 1.55$, respectivamente.

absorción de la partícula es aproximadamente cero para longitudes de onda mayores a $\lambda = 420$ nm. Al comparar el máximo de la absorción para a = 90 nm, localizado alrededor de $\lambda = 362$ nm, la eficiencia de esparcimiento es 1.6 veces mayor. Por tanto, se decidió estudiar la posibilidad de obtener las condiciones de Kerker para la partícula de SiC de radio 90 nm.

En la gráfica superior de la Fig. 2.9(a) se presentan las eficiencias de esparcimiento frontal (línea roja) y retroesparcimiento (línea negra) para la partícula de SiC de radio 90 nm inmersa en aire. Se obtiene que, dentro del rango de longitudes de onda estudiado (300–1,000 nm), la magnitud del esparcimiento frontal siempre es mayor a la magnitud de la eficiencia de retroesparcimiento. Es interesante notar que la eficiencia de esparcimiento frontal no muestra mínimos que se aproximen a cero dentro del rango espectral de interés. En contraste, la eficiencia de retroesparcimiento presenta un mínimo alrededor de $\lambda = 549$ nm [línea vertical magenta en la Fig. 2.9(a)] donde se aproxima a cero.



Fig. 2.9: (a) Eficiencias de esparcimiento frontal (línea roja) y de retroesparcimiento (línea negra) en función de la longitud de onda y de la energía, para una partícula esférica de carburo de silicio de radio 90 nm inmersa en aire. Asimismo, se muestran las contribuciones individuales de los coeficientes de Mie: a_1 (línea azul), a_2 (línea naranja), b_1 (línea punteada azul) y b_2 (línea punteada naranja). En la figura inferior, se grafica la diferencia de fase relativa para la condición $3(a_1 - b_1) = 5(a_2 - b_2)$ (línea negra). Las líneas verticales punteadas indican los valores de longitud de onda $\lambda = 340$ nm (verde), $\lambda = 463$ nm (cian) y $\lambda = 549$ nm (magenta). Los cálculos del patrón de radiación se presentan en gráficas 3D y gráficas polares con cortes en los planos $\phi = 0$ (línea azul) y $\phi = \pi/2$ (línea naranja) para (b) $\lambda = 549$ nm, (c) $\lambda = 463$ nm y (c) $\lambda = 340$ nm. Se asume que el vector de onda incidente es paralelo al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$, mientras que el campo eléctrico \mathbf{E}_i es paralelo a $\hat{\mathbf{e}}_x$. Las líneas punteadas azul y naranjada señalan la apertura de α_1 y α_2 .

En la gráfica inferior de la Fig. 2.9(a) se presenta la diferencia de fase relativa. Se observan tres longitudes de onda donde la diferencia de fase es cercana a cero. En primer lugar, con $\lambda = 549$ nm, se encuentra que el mínimo de retroesparcimiento corresponde a un mínimo en la diferencia de fase. Por otra parte, el resto de los mínimos de la diferencia de fase se encuentra en $\lambda = 340$ nm [línea vertical punteada verde en la Fig. 2.9(a)] y alrededor de $\lambda = 463$ nm [línea vertical punteada cian en la Fig. 2.9(a)].

Es interesante hacer notar que dichos mínimos en la diferencia de fase son cercanos a puntos donde las contribuciones de los coeficientes se igualan. En el caso de $\lambda = 546$ nm y $\lambda = 463$ nm, se hallan cercanas a longitudes de onda donde las contribuciones dipolares se igualan. Alrededor de $\lambda = 340$ nm, ambos cuadrupolos tienen contribuciones comparables a los dipolos y existe una longitud de onda donde sus contribuciones son iguales.

Con el propósito de verificar la aparición de efectos de interferencia multipolar, se calcularon los patrones de radiación para las longitudes de onda $\lambda = 549$ nm [Fig. 2.9(b)], $\lambda = 463$ nm [Fig. 2.9(c)] y $\lambda = 340$ nm [Fig. 2.9(d)]. Se presenta el patrón de radiación en 3D a la izquierda de las gráficas polares correspondientes al patrón de radiación en los planos $\phi = 0$ (línea continua azul) y $\phi = \pi/2$ (línea continua naranja). Con $\lambda = 549$ nm, se obtiene esparcimiento direccional, puesto que el retroesparcimiento de la partícula se anula. De acuerdo a la distribución angular del patrón, puede asumirse que proviene de la interferencia entre el DE y el DM. Por tanto, se infiere que en $\lambda = 549$ nm, se satisface la primera condición de Kerker. En la Fig. 2.9(c), se muestra el patrón de radiación con $\lambda = 463$ nm. Se observa que el esparcimiento frontal domina respecto al retroesparcimiento en ambos planos. Sin embargo, el retroesparcimiento tiene una magnitud que es al menos la mitad del esparcimiento frontal. Por último, para $\lambda = 340$ nm [Fig. 2.9(d)] se confirma que la partícula esparce principalmente en la dirección frontal. Se encuentra un lóbulo en la dirección de retroesparcimiento, cuya magnitud es ~ 5.8 veces menor al esparcimiento en la dirección frontal. Asimismo, es interesante notar que la forma del patrón de radiación es más compleja comparada a la obtenida en Fig. 2.9(b), y se atribuye a que no sólo hay interferencia de los dipolos, sino también de ambos cuadrupolos.

En cuanto a la direccionalidad, se encuentra que para $\lambda = 549$ nm [Fig. 2.9(b)] $\alpha_1 = 119.2^{\circ}$ y $\alpha_2 = 123^{\circ}$. En el caso de $\lambda = 463$ nm, debido a que en la Fig. 2.9(c) no se distingue un lóbulo que parta desde el origen, no es posible medir el valor de α_1 , ni de α_2 . Por último, para el patrón de radiación en la Fig. 2.9(d) $\alpha_2 = 72.2^{\circ}$. Por tanto, se concluye que con $\lambda = 340$ nm se obtiene mayor direccionalidad en el plano $\phi = \pi/2$, lo cual se atribuye a la presencia de los cuadrupolos.

1.2 Partículas con respuesta metálica

1.2.1 Oro

El oro es un metal noble cuyo índice de refracción se muestra en la Fig. 2.10(a). Los datos experimentales (puntos) del índice de refracción fueron obtenidos en la referencia [96]. En la Fig. 2.10(a) se presentan tanto su parte real ($\operatorname{Re}\{N\}$, rojo) como imaginaria ($\operatorname{Im}\{N\}$, azul) en función de la longitud de onda (eje inferior) y la energía (eje superior). Las líneas continuas son interpolaciones hechas a partir de las mediciones. El valor de la parte real del índice de refracción es menor a 2 dentro del rango estudiado. En cambio, la parte imaginaria puede llegar a valores mayores a 10. En la Fig. 2.10(b) se presenta la función dieléctrica del oro calculada a partir de los datos del índice de refracción. De igual forma, el rojo se asocia con la parte real ($\operatorname{Re}\{\epsilon\}$) y el azul con la imaginaria ($\operatorname{Im}\{\epsilon\}$). En la gráfica de la función dieléctrica se observa que la parte real es negativa para longitudes de onda dentro del rango visible y parte del infrarrojo. Por otro lado, $\operatorname{Im}\{\epsilon\}$ tiene valores distintos a cero, lo cual indica que el material presenta pérdidas, localizando un mínimo alrededor de $\lambda \approx 680$ nm.

Las eficiencias de extinción [Fig. 2.11(a)] y absorción [Fig. 2.11(b)] se presentan en función de la longitud de onda incidente y del radio de una partícula esférica, considerando una matriz de aire $(n_m = 1)$. En la Fig. 2.11(a) se observa que la eficiencia de extinción presenta una contribución apreciable para radios mayores a 25 nm y se extiende sobre todo el rango espectral considerado. En particular, su magnitud es mayor a 4 para regiones bien localizadas que se asocian a posibles resonancias de los coeficientes de esparcimiento de Mie. Con el propósito de distinguir el origen y comportamiento de cada una de las resonancias, se presentan cortes de las contribuciones de los coeficientes a_1 [gráfica superior en



Fig. 2.10: (a) Índice de refracción del oro en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Los datos experimentales (puntos) se obtuvieron de la referencia [96]. (b) Función dieléctrica del oro calculada a partir de los datos experimentales del índice de refracción, en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Las partes reales ($\operatorname{Re}\{N\}$, $\operatorname{Re}\{\epsilon\}$) tanto del índice de refracción como de la función dieléctrica se indican con rojo, mientras que las imaginarias ($\operatorname{Im}\{N\}$, $\operatorname{Im}\{\epsilon\}$) con azul. En ambas gráficas las líneas continuas son interpolaciones hechas a partir de los datos experimentales.

la Fig. 2.11(c)] y a_2 [gráfica inferior en la Fig. 2.11(c)] a la eficiencia de extinción, en función de la longitud de onda, para once valores del radio de la partícula entre 10 (línea azul) y 150 nm (línea rojo obscuro). En el caso del DE (a_1 , gráfica superior), se aprecia que para radios mayores a 20 nm se define la resonancia, la cual alcanza su magnitud máxima para a = 70 nm. Al incrementar el tamaño de la partícula, se observa el corrimiento de la resonancia hacia el rojo, así como un ensanchamiento. En contraste, la resonancia del CE (a_2 , gráfica inferior) se define para radios mayores a 90 nm y su magnitud es máxima para a = 150 nm. De igual forma, se observa el corrimiento al rojo debido al incremento de tamaño. Cabe resaltar que para un radio fijo, por ejemplo a = 130 nm [línea vertical punteada blanca en las Figs. 2.11(a) y 2.11(b)], la resonancia del CE aparece para longitudes de onda más cortas respecto a la resonancia del DE. Como ejemplo, en las gráficas de la Fig. 2.11(c) se indican con líneas punteadas negras la posición de las resonancias del DE y el CE, localizadas alrededor de $\lambda \approx 720$ nm y $\lambda \approx 570$ nm, respectivamente. Por tanto, la respuesta óptica de la partícula de oro embebida en aire, dentro de los rangos de tamaño y longitud de onda considerados, está dominada por el DE y el CE inducidos.

La eficiencia de absorción [Fig. 2.11(b)] es distinta de cero para longitudes de onda menores a $\lambda = 600$ nm. Se observa que para radios entre 40–70 nm y alrededor de $\lambda = 520$ nm, la absorción es máxima (~ 2.7). Cabe destacar que la absorción presenta una magnitud relevante dentro de un amplio rango de valores del radio, sólo para a < 15 nm la eficiencia de absorción se aproxima a cero. Además, la magnitud máxima obtenida para la eficiencia de absorción (~ 2.7) es dos veces menor al máximo de extinción obtenido dentro de los mismos rangos de longitudes de onda y radio, por lo que los procesos de esparcimiento son importantes.

La dependencia de la eficiencia de esparcimiento con el índice de refracción de la matriz se estudia comparando las matrices de aire [Fig. 2.12(a)], agua [Fig. 2.12(b)] y vidrio [Fig. 2.12(c)]. En el caso de la matriz de aire, la eficiencia de esparcimiento tiene una magnitud mayor a la unidad para radios desde 45 nm, aproximadamente, y se extiende en un rango amplio de longitudes de onda. Alcanza su valor máximo (~ 4.4) para radios cercanos a 90 nm. Es interesante notar que la eficiencia de esparcimiento aumenta considerablemente para longitudes de onda mayores a $\lambda = 500$ nm. Por otra parte, al aumentar el índice de refracción de la matriz a 1.33, se observa la aparición de dos resonancias [Fig. 2.12(b)]. El máximo de la eficiencia de esparcimiento es cercano a 5.4. Asimismo, vale la pena señalar que la eficiencia de esparcimiento para $\lambda \leq 500$ nm deja de ser significativa, en comparación del resto del rango espectral. En la Fig. 2.12(b) se observa que ambas resonancias se separan y son fácilmente distinguibles.



Fig. 2.11: Eficiencias de (**a**) extinción y (**b**) absorción de una partícula esférica de oro inmersa en aire, en función del radio y la longitud de onda incidente. La línea vertical punteada blanca indica la posición de a = 130 nm. (**c**) Contribuciones individuales de los coeficientes a_1 (gráfica superior) y a_2 (gráfica inferior) a la eficiencia de extinción, para radios entre 10 nm (línea azul) y 150 nm (línea rojo obscuro), en función de la longitud de onda (eje inferior) y la energía (eje superior). Las líneas verticales punteadas negras denotan a la longitud de onda central para las resonancia del DE y CE correspondientes a a = 130 nm.

Por último, con $n_m = 1.5$ [Fig. 2.12(c)], se obtiene una separación mayor entre las resonancias y un aumento en el máximo (~ 6) respecto a las matrices de aire y agua. Cabe resaltar que a pesar de variar el tamaño de la partícula y la matriz que la rodea, no es posible lograr que la magnitud de la eficiencia de esparcimiento aumente para longitudes de onda menores a de 500 nm. A partir de los resultados anteriores, se muestra que la respuesta óptica de una partícula de oro tiene contribuciones importantes de multipolos eléctricos. También se muestra que la resonancia del CE se define para radios mayores a 80 nm. Por otro lado, la eficiencia de absorción [Fig. 2.11(b)], para a = 130 nm es menor a la de la eficiencia de esparcimiento, dentro del rango espectral estudiado. En particular, el máximo de la absorción, localizado alrededor de $\lambda = 500$ nm, es 1.33 veces menor al esparcimiento para la misma longitud de onda. Por tal motivo, se elige estudiar con mayor detalle a la partícula de radio 130 nm.

En las Figs. 2.13(a) y 2.13(b) se muestran las contribuciones de los coeficientes a_1 y a_2 a la eficiencia de esparcimiento para diferentes matrices. Para la resonancia del DE [Fig. 2.13(a)] se obtiene un corrimiento de 405 nm hacia el rojo debido al incremento del índice de refracción. También se aprecia una ligera disminución de la magnitud de la resonancia al igual que un ensanchamiento, ambos debidos al incremento del índice de refracción de la matriz. En el caso del CE [Fig. 2.13(b)], el corrimiento al rojo es aproximadamente de 144 nm. Es importante mencionar que los corrimientos obtenidos con la partícula de oro son mayores a los conseguidos con las partículas dieléctricas. Por otra parte, se observa que la eficiencia de esparcimiento del CE presenta un aumento monótono al incrementar el valor de n_m , llegando hasta 2.4, aproximadamente. Cabe destacar que para el cálculo realizado con $n_m = 1.55$, la diferencia de magnitudes entre el DE y el CE es 0.8, mientras que para $n_m = 1$ corresponde a tres. Por tanto, para matrices con índices de refracción mayores a la unidad, el cuadrupolo eléctrico representa una contribución importante.



Fig. 2.12: Eficiencia de esparcimiento de una partícula esférica de oro, en función del radio y la longitud de onda incidente. Se consideran las matrices de (a) aire ($n_m = 1$), (b) agua ($n_m = 1.33$) y (c) vidrio ($n_m = 1.5$). Las líneas verticales punteadas blancas indican a = 130 nm.

Los cálculos para determinar si se presentan efectos tipo Kerker se realizan para la partícula de radio 130 nm. En la gráfica superior de la Fig. 2.14(a) se presentan resultados de las eficiencias de esparcimiento frontal (línea roja) y retroesparcimiento (línea negra). También se muestran las contribuciones de los coeficientes a_1 (línea azul), a_2 (línea naranja), b_1 (línea punteada azul) y b_2 (línea punteada naranja). De acuerdo a estos resultados, se espera que la interferencia se origine a partir de la resonancia del DE, localizada alrededor de $\lambda = 736$ nm, y del CE, centrado en $\lambda = 533$ nm. Cabe destacar que las contribuciones del DM y CM son distintas a cero, pero sin resonancias dentro del rango espectral de interés.

La diferencia de fase relativa se calcula a partir de la condición $3(a_1 - b_1) = 5(a_2 - b_2)$ [gráfica inferior en la Fig. 2.14(a)]. Dentro del rango espectral de interés se encuentra solamente un mínimo de la eficiencia de retroesparcimiento cercano a cero para $\lambda = 527$ nm (línea punteada verde), en donde se aprecia que las contribuciones del DE y CE no tienen magnitudes iguales.



Fig. 2.13: Contribuciones individuales a la eficiencia de esparcimiento calculadas para los coeficientes (**a**) a_1 y (**b**) a_2 , en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior), considerando una partícula esférica de oro de radio 130 nm. El índice de refracción de la matriz varía entre 1 (línea amarilla) y 1.55 (línea azul). Las líneas verticales punteadas amarilla y azul indican la posición de las resonancias para $n_m = 1$ y $n_m = 1.55$, respectivamente.
El campo lejano esparcido por la esfera de oro de a = 130 nm para $\lambda = 527$ nm se muestra en la Fig. 2.14(b). En la parte superior de la Fig. 2.14(b) se presenta el patrón de radiación en 3D, mientras que en la parte inferior se muestran gráficas polares para los cortes del campo lejano en los planos $\phi = 0$ (línea azul) y $\phi = \pi/2$ (línea naranja). Se observa un patrón de radiación con un lóbulo principal en la dirección $\hat{\mathbf{e}}_z$ (dirección frontal) y dos lóbulos secundarios en el eje $\hat{\mathbf{e}}_x$. Además, se obtiene que el retroesparcimiento se aproxima a cero. En la gráfica polar para $\phi = 0$, los lóbulos secundarios son visibles dentro del hemisferio $\theta \in [\pi/2, 3\pi/2]$, mientras que para $\phi = \pi/2$ no se observa. La magnitud máxima de los lóbulos secundarios es al menos tres veces menor a la magnitud máxima del lóbulo principal. Para ambos planos se obtiene que el retroesparcimiento es nulo. Adicionalmente, se estima que para el lóbulo principal $\alpha_1 \approx 58^\circ$ y $\alpha_2 \approx 126^\circ$. Por tanto, en el plano $\phi = 0$, el patrón de radiación presenta mayor direccionalidad.



Fig. 2.14: (a) Eficiencias de esparcimiento frontal (línea roja) y de retroesparcimiento (línea negra) en función de la longitud de onda y la energía, para una partícula esférica de oro de radio 130 nm inmersa en aire. Asimismo, se muestran las contribuciones individuales de los coeficientes de Mie: a_1 (línea azul), a_2 (línea naranja), b_1 (línea punteada azul) y b_2 (línea naranja punteada). En la figura inferior, se grafica la diferencia de fases relativa para la condición $3(a_1 - b_1) = 5(a_2 - b_2)$ (línea magenta). La línea vertical punteada verde indica el valor de longitud de onda $\lambda = 527$ nm. (b) El cálculo del patrón de radiación se presenta en una gráfica 3D y una polar con cortes en los planos $\phi = 0$ (línea azul) y $\phi = \pi/2$ (línea naranja) para $\lambda = 527$ nm. Se asume que el vector de onda incidente es paralelo al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$, mientras que el campo eléctrico \mathbf{E}_i es paralelo a $\hat{\mathbf{e}}_x$. Las líneas punteadas azul y naranja señalan la apertura de α_1 y α_2 .

1.2.2 Bismuto

El bismuto (Bi) es un semimetal que ha generado interés recientemente debido a sus propiedades plasmónicas dentro del rango visible e infrarrojo [40, 41]. La función dieléctrica del bismuto en bulto se muestra en la Fig. 2.15(a), donde las estrellas corresponden a los datos experimentales obtenidos de la referencia [97]; las líneas continuas corresponden a ajustes hechos por los autores de la referencia [97]. En la Fig. 2.15(b) se muestra el índice de refracción del bismuto. En ambas gráficas, el rojo corresponde

a la parte real (eje izquierdo) y el azul a la imaginaria (eje derecho). Dentro del rango de longitudes de onda estudiado (300–1,000 nm), la parte real de la función dieléctrica es negativa y no presenta cambio de signo, mientras que la parte imaginaria de la función dieléctrica es distinta de cero dentro del mismo rango espectral. A partir de la función dieléctrica se confirma que el bismuto es un material que tiene un comportamiento metálico.



Fig. 2.15: (a) Función dieléctrica del bismuto en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Los datos experimentales (indicados con estrellas) se obtuvieron de la referencia [97]. (b) Índice de refracción del bismuto calculado a partir de los datos experimentales de la función dieléctrica, en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior). Las partes reales ($\operatorname{Re}\{N\}$, $\operatorname{Re}\{\epsilon\}$, ejes izquierdos) tanto del índice de refracción como de la función dieléctrica se indican con rojo, mientras que las imaginarias ($\operatorname{Im}\{N\}$, $\operatorname{Im}\{\epsilon\}$, ejes derechos) con azul. En ambas gráficas las líneas continuas corresponden a ajustes reportados en [97], a partir de sus mismos datos experimentales.

En la Fig. 2.16 se muestran la eficiencia de extinción [Fig. 2.16(a)] y de absorción [Fig. 2.16(b)] asociadas a una partícula esférica de bismuto inmersa en aire. Ambas eficiencias se presentan en función del radio de la partícula y de la longitud de onda del haz incidente. En la gráfica de la eficiencia de extinción [Fig. 2.16(a)] se observa una región dentro de la cual la magnitud es mayor a cuatro, alcanzando un máximo de cinco. De manera análoga al caso de la partícula de oro, no es posible distinguir claramente a las resonancias. También es interesante notar que para radios menores a 10 nm, la extinción comienza a aproximarse a cero. Además, se obtiene que alrededor de a = 60 nm se alcanza el máximo valor de la eficiencia de extinción. La eficiencia de extinción tiene contribuciones para un rango amplio de valores del radio y de longitudes de onda. A partir de radios mayores a ~ 125 nm, la extinción es distinta a cero para longitudes de onda entre 300-1,000 nm.

Para identificar con mayor claridad las contribuciones de distintas resonancias a la eficiencia de extinción, en la Fig. 2.16(a) se muestran las contribuciones individuales de los multipolos DE (a_1) , CE (a_2) y DM (b_1) . Asimismo, se muestran cortes para distintos radios entre 10 (línea azul) y 150 nm (línea rojo obscuro). Se observa que para el DE [gráfica superior en la Fig. 2.16(c)] la resonancia se define para radio mayores a 50 nm y la magnitud máxima (~ 4.4) se obtiene con a = 60 nm. Adicionalmente, la resonancia presenta un corrimiento hacia longitudes de onda más largas y un ensanchamiento cuando se incrementa el tamaño de la partícula. Por otro lado, para el CE [gráfica central en la Fig. 2.16(c)] se observa que la resonancia está bien definida para radio mayores a 100 nm y alcanza su máximo para un radio de 130 nm. Cabe resaltar que la contribución del CE se aproxima a cero para longitudes de onda mayores a ~ 800 nm. En contraste, la contribución del DE se extiende más allá de 1,400 nm. Es interesante hacer notar que para radios mayores a 130 nm, se define una resonancia de b_1 dentro del rango espectral considerado [gráfica inferior en la Fig. 2.16(c)], cuya magnitud máxima es cercana 0.7. Por tanto, la respuesta óptica de la partícula es dominada por el DE y el CE.



Fig. 2.16: Eficiencias de (a) extinción y (b) absorción para una partícula esférica de bismuto inmersa en una matriz de aire $(n_m = 1)$, en función del radio de la partícula y de la longitud de onda incidente. La línea vertical punteada blanca indica la posición de a = 130 nm. (c) Contribuciones individuales de los coeficientes a_1 (gráfica superior), a_2 (gráfica central) y b_1 (gráfica inferior) a la eficiencia de extinción, para radios entre 10 nm (línea azul) y 150 nm (línea roja obscura), en función de la longitud de onda (eje inferior) y la energía (eje superior). Las líneas verticales negras indican las posiciones de las resonancias de cada coeficiente.

Por otro lado, la eficiencia de absorción [Fig. 2.16(b)] es cercana a cero para longitudes de onda mayores a ~ 500 nm. Al igual que la eficiencia de extinción, la eficiencia de absorción es considerable para radios dentro del intervalo ~ 10 nm $\leq a \leq 150$ nm, y alcanza el máximo (~ 2.3) cuando la partícula tiene un radio de ~ 35 nm. Al comparar con el máximo obtenido en la eficiencia de extinción, la absorción es aproximadamente 2.2 veces menor, por lo que el esparcimiento no es despreciable. En particular, alrededor de a = 130 nm (línea vertical punteada blanca) la eficiencia de esparcimiento es mayor a la de absorción. El valor máximo de la eficiencia de absorción es cercano a 1.5 alrededor de $\lambda = 365$ nm, mientras que la magnitud de la eficiencia de esparcimiento es 1.8 veces mayor para la misma longitud de onda. Por tanto, con a = 130 nm, la extinción se debe principalmente a esparcimiento.

La eficiencia de esparcimiento asociada a la partícula esférica de bismuto embebida en aire se muestra en la Fig. 2.17(a). Se identifican las mismas dos resonancias observadas en la eficiencia de extinción. Cada una de las resonancias se asocian al DE y al CE, siendo la correspondiente al DE la de mayor magnitud y presente para longitudes de onda mayores. La resonancia del CE se define mejor para radios mayores a 100 nm, mientras que la del DE se observa desde a = 50 nm. Dentro de los rangos de radio y longitud de onda estudiados, se obtiene que la magnitud máxima de la eficiencia de esparcimiento es ~ 4 , por tanto es 1.25 veces menor al máximo de la extinción y 1.7 veces mayor al de la eficiencia de absorción.

Al igual que para los materiales anteriormente estudiados, para el caso del bismuto también se realizaron cálculos de la eficiencia de esparcimiento usando matrices de agua $[n_m = 1.33, \text{Fig. } 2.17(b)]$ y vidrio



Fig. 2.17: Eficiencia de esparcimiento de una partícula esférica de bismuto en función del radio y de la longitud de onda incidente. Se consideran distintos materiales para la matriz: (a) matriz de aire $(n_m = 1)$, (b) matriz de agua $(n_m = 1.33)$ y (c) matriz de vidrio $(n_m = 1.5)$. La línea vertical punteada indica a = 130 nm.

 $[n_m = 1.5, \text{Fig. 2.17(c)}]$. Para la matriz de agua se obtiene un aumento del máximo de la eficiencia de esparcimiento respecto de la matriz de aire de ~ 4 a ~ 4.9 . Además, se produce una separación de las resonancias, lo cual permite identificarlas más fácilmente. También se aprecia la aparición de una tercera resonancia que se identifica como el OE. Se observa que a partir de valores de radio cercanos a 110 nm, la resonancia comienza a definirse. Por último, al considerar la matriz de vidrio, el máximo en la eficiencia de esparcimiento aumenta a ~ 5.2 . Las resonancias continúan definidas y se distingue claramente la del OE, observándose que la magnitud de la eficiencia de esparcimiento es considerable desde radios cercanos a ~ 20 nm. Vale la pena mencionar que para todas las matrices consideradas se observa un corrimiento hacia el rojo al incrementarse el radio.

Puesto que para una partícula de radio 130 nm predomina el esparcimiento respecto a la absorción, se decidió estudiar los cambios de las resonancias en función del índice de refracción de la matriz. En la Fig. 2.18 se muestra la contribución de los multipolos DE, CE, OE y DM a la eficiencia de esparcimiento, considerando distintos valores de n_m , entre 1 (línea amarilla) y 1.55 (línea violeta). Para el caso del DE [Fig. 2.18(a)], se observa un corrimiento de 404 nm hacia el rojo al aumentar n_m . De igual manera, para el CE [Fig. 2.18(b)] también se observa un corrimiento de 194 nm hacia longitudes de onda más largas. En lo que concierne a las magnitudes de las eficiencias de esparcimiento, para el DE se observa una ligera disminución al aumentar el índice de la matriz. En cambio para el CE, la eficiencia aumenta por un factor de 1.1 aproximadamente. Ambas resonancias muestran un ensanchamiento al incrementar el valor de n_m . Al analizar las contribuciones del coeficiente a_3 (OE), se aprecia que la resonancia se define a partir de $n_m = 1.22$ y su eficiencia aumenta al incrementar el valor de n_m . De igual forma se aprecia un corrimiento hacia el rojo. En el caso del DM [Fig. 2.18(d)] la resonancia presenta un corrimiento de 195 nm hacia el rojo al cambiar de $n_m = 1$ a $n_m = 1.55$, decreciendo su magnitud para luego volver a aumentar hasta 0.6.

Para estudiar la presencia de efectos tipo Kerker se considera una la partícula de radio 130 nm. Se calculan las eficiencias de esparcimiento frontal [línea roja en la gráfica superior de la Fig. 2.19(a)] y retroesparcimiento [línea negra en la gráfica superior de la Fig. 2.19(a)]. Asimismo, se grafican las contribuciones a Q_{scat}^{back} y Q_{scat}^{forw} de los coeficientes a_1 (línea azul), a_2 (línea naranja), b_1 (línea punteada azul) y b_2 (línea punteada naranja). Se observa que dentro del intervalo de longitudes de onda 300–700 nm, el esparcimiento frontal tiene una magnitud mayor a la eficiencia de retroesparcimiento. Además, dentro del mismo rango, se observa sólo un mínimo para el retroesparcimiento en $\lambda = 490$ nm (línea vertical punteada magenta) y un máximo del esparcimiento frontal cercano a $\lambda = 428$ nm (línea vertical punteada



Fig. 2.18: Contribuciones individuales a la eficiencia de esparcimiento calculadas para los coeficientes (**a**) a_1 , (**b**) a_2 , (**c**) b_1 y (**d**) b_2 , en función de la longitud de onda (eje inferior) y de la energía (eje superior), considerando una partícula esférica de bismuto de radio 130 nm. El índice de refracción de la matriz se varía entre 1 (línea amarilla) y 1.55 (línea azul). Las líneas verticales punteadas amarilla y azul indican la posición de las resonancias para $n_m = 1$ a $n_m = 1.55$, respectivamente.

cian). Cabe destacar que si bien sólo se aprecian las resonancias del DE y CE, hay contribuciones del DM y CM distintas a cero. Por ello, en la Fig. 2.19(a) se muestra la diferencia de fase relativa para la condición $3(a_1 - b_1) = 5(a_2 - b_2)$ [gráfica inferior en la Fig. 2.19(a)]. Se observa que dentro del intervalo de longitudes de onda 300–1,000 nm, se localiza un mínimo en la diferencia de fase en $\lambda = 481$ nm. Debido a la cercanía entre el mínimo de retroesparcimiento y de la diferencia de fase, se asume que alrededor de $\lambda = 490$ nm se puede obtener un efecto tipo Kerker. El corrimiento entre el mínimo de retroesparcimiento y el de la diferencia de fase relativa puede atribuirse al OE. Los resultados del análisis multipolar del esparcimiento [Figs. 2.17(a) y 2.18(c)] muestran que si bien no hay una resonancia del OE, su contribución no es despreciable.

Con el propósito de verificar la obtención de patrones de radiación unidireccional, se calcula la sección transversal de esparcimiento diferencial para $\lambda = 490$ nm [Fig. 2.19(b)] y $\lambda = 428$ nm [Fig. 2.19(c)]. Nuevamente, se presentan gráficas polares para los planos $\phi = 0$ (línea continua azul) y $\phi = \pi/2$ (línea continua naranja), junto a gráficas en 3D de los patrones de radiación. Se observa que a $\lambda = 490$ nm el patrón de radiación presenta un lóbulo principal dirigido hacia la dirección frontal, acompañado de dos lóbulos secundarios. En las gráficas polares se obtiene que, en el plano $\phi = \pi/2$, el lóbulo del patrón de radiación tiene un HPB estimado en $\alpha_2 = 138.7^\circ$, y que, además, el retroesparcimiento es prácticamente nulo. Para $\phi = 0$, se obtiene que el esparcimiento producido por los lóbulos secundarios es dos veces menor a la magnitud del patrón de radiación en $\theta = 0$. El patrón de radiación muestra mayor direccionalidad respecto al resultado en el plano $\phi = \pi/2$, puesto que se estima que para el lóbulo principal $\alpha_1 = 59.6^\circ$. Por otra parte, resulta interesante analizar el caso en donde la eficiencia de esparcimiento frontal es máxima. Esto ocurre en $\lambda = 428$ nm. Los resultados se muestran en la Fig. 2.17(c) donde se puede observar que, en el plano $\phi = 0$, el patrón de radiación tiene tres lóbulos; el lóbulo principal está dirigido en la dirección $\theta = 0$, los secundarios se encuentran dirigidos hacia



Fig. 2.19: (a) Eficiencias de esparcimiento frontal (línea roja) y de retroesparcimiento (línea negra) en función de la longitud de onda, para una partícula esférica de bismuto de radio 130 nm inmersa en aire. Asimismo, se muestran las contribuciones individuales de los coeficientes de Mie: a_1 (línea azul), a_2 (línea naranja), b_1 (línea azul punteada) y b_2 (línea naranja punteada). En la figura inferior, se grafica la diferencia de fases relativa para la condición $3(a_1 - b_1) = 5(a_2 - b_2)$ (línea verde). Las líneas punteadas verticales indican los valores de longitudes de onda $\lambda = 428$ nm (línea cian) y $\lambda = 490$ nm (línea magenta). Los cálculos del patrón de radiación se presentan en gráficas 3D y gráficas polares con cortes en los planos $\phi = 0$ (línea azul) y $\phi = \pi/2$ (línea naranja) para (b) $\lambda = 490$ nm y (c) $\lambda = 428$ nm. Se asume que el vector de onda incidente es paralelo al eje $\hat{\mathbf{e}}_z$, mientras que el campo eléctrico \mathbf{E}_i es paralelo a $\hat{\mathbf{e}}_x$. Las líneas punteadas azul y naranjada señalan la apertura de α_1 y α_2 .

 $\theta \approx \pi/2$ y un terciario en la dirección $\theta = \pi$, siendo éste último el de menor magnitud. Para $\phi = \pi/2$ el patrón de radiación muestra sólo dos lóbulos, uno en la dirección $\theta = 0$ y otro en $\theta = \pi$. El lóbulo en la dirección de retroesparcimiento es aproximadamente 8.6 veces menor a la magnitud del patrón de radiación en la dirección frontal, sin embargo, no es nulo, como se obtiene con $\lambda = 490$ nm. Se determina que, para el lóbulo principal de cada plano, $\alpha_1 = 57.3^\circ$ y $\alpha_2 = 111.6^\circ$, por tanto la radiación obtenida con $\lambda = 428$ nm muestra mayor direccionalidad respecto a lo conseguido con $\lambda = 490$ nm. Debido a los patrones de radiación obtenidos se comprueba que el retroesparcimiento se minimiza con $\lambda = 490$ nm y se concluye que hay interferencia entre el DE y CE.

2 REFLECTIVIDAD Y TRANSMITANCIA EN METASUPERFICIES DESORDENADAS

En la sección anterior se determinaron los tamaños óptimos para partículas de silicio, carburo de silicio, oro y bismuto con las que se pueden obtener efectos tipo Kerker. En esta sección se estudia la reflectividad y la transmitancia coherente de metasuperficies compuestas por partículas esféricas idénticas localizadas de forma aleatoria. La sección se divide en dos partes. Primero se analizan las propiedades ópticas de la monocapa suspendida en espacio libre (sin sustrato) y la relación con el esparcimiento de luz debido a la

partícula individual. Posteriormente, se presentan los resultados de la reflectancia y la transmitancia para monocapas soportadas en distintos sustratos.

2.1 Monocapa desordenada suspendida en el espacio libre

Para el análisis de la reflectividad y transmitancia coherente de una monocapa sin sustrato, es decir, suspendida en el espacio libre, se utiliza el modelo de esparcimiento coherente descrito en la sección 4 del primer capítulo. La reflectividad de la monocapa se calcula como $R = |r_{coh}|^2$. Por otro lado, de acuerdo a la Ec. (1.22) y considerando que el medio de incidencia es igual al medio de transmisión ($n_i = n_t$), se tiene que la transmitancia coherente se calcula como $T = |t_{coh}|^2$. Los coeficientes de reflexión y transmisión, r_{coh} y t_{coh} están dados por las Ecs. (1.138a) y (1.138b), respectivamente. Con el propósito de visualizar de forma eficiente el comportamiento de la reflectividad, se presentan los resultados en función de la longitud de onda incidente y del ángulo de incidencia con dos escalas de color: se usa una escala de grises que va de 0 (negro) a 0.01 (blanco), mientras que para el intervalo $0.01 < R < R^{m \dot{a}x}$. donde R^{max} denota el máximo de reflectividad obtenido, se usa una escala de color entre azul y rojo. Para la transmitancia coherente sólo se utiliza la escala de color entre azul y rojo. Cabe mencionar que tanto para los cálculos de reflectividad como de transmitancia se utiliza un valor máximo del ángulo de incidencia igual a 60°. Esto debido a que para ángulos mayores se presentan *efectos de sombra* (la sombra que produce una partícula puede sobreponerse sobre otra partícula en la monocapa) que el CSM no contempla (ver Apéndice B). Al igual que en el caso de partícula individual, se estudian la reflectividad y la transmitancia dentro del rango de longitudes de onda de $\lambda = 300$ nm a $\lambda = 1,000$ nm.

2.1.1 Monocapa desordenada de partículas de silicio

En la Fig. 2.20 se muestra la reflectividad y la transmitancia coherente asociadas a una monocapa desordenada compuesta por partículas de silicio de radio 60 nm. En las Figs. 2.20(a-f) se muestra la reflectividad del sistema considerando ambas polarizaciones p (primera columna) y s (segunda columna). y se consideran tres fracciones de cubierta: $\Theta = 5\%$, 10% y 20%. Se muestran dos líneas verticales punteadas blancas que indican la posición de $\lambda = 559$ nm [condición de mínimo retroesparcimiento para la partícula individual, ver Fig. 2.4(b)] y $\lambda = 487$ nm [condición de mínimo esparcimiento frontal para la partícula individual, ver Fig. 2.4(c)]. Para la reflectividad de la monocapa con $\Theta = 5$ %, en polarización p [Fig. 2.20(a)], se obtiene que su valor máximo dentro de los rangos de longitud de onda y ángulo de incidencia estudiados es ~ 0.095 alrededor de $\lambda = 525$ nm. Para ángulos de incidencia mayores a 50°, la reflectividad alcanza valores entre 0.06 y el máximo. Por otra parte, se identifican dos zonas donde la reflectividad es menor a 0.01. Una de estas zonas se localiza entre 300-435 nm y otra en el intervalo 535–1,000 nm, para todo el rango de ángulos de incidencia. Es interesante notar que existe un amplio rango de parámetros para los cuales la reflectividad se aproxima a cero y que, conforme aumenta el ángulo de incidencia, se recorre hacia longitudes de onda mayores. Asimismo, cabe resaltar que, para ángulos de incidencia pequeños ($\theta_i \lesssim 25^\circ$), la reflectividad es máxima cerca de la condición de esparcimiento frontal mínimo de la partícula individual ($\lambda = 487$ nm), y el mínimo de la reflectividad está localizado cerca de la condición de retroesparcimiento mínimo de partícula individual ($\lambda = 559$ nm).

Al incrementar la fracción de cubierta Θ a 10 % y 20 %, Figs. 2.20(c) y 2.20(e), respectivamente, la reflectividad global aumenta. Para $\Theta = 10$ %, la reflectividad máxima es ~ 0.22, mientras que para $\Theta = 20$ % es ~ 0.37. En ninguno de estos casos hay un cambio significativo en el comportamiento general, ya que sigue existiendo un máximo de reflectividad localizado cerca de $\lambda = 487$ nm y las regiones donde la reflectividad es cercana a cero siguen apareciendo, definiéndose mejor conforme crece Θ . Para ángulos pequeños, la condición para reflectividad mínima sigue estando alrededor de $\lambda = 559$ nm. Es interesante hacer notar que al aumentar la fracción de cubierta, la reflectividad para ángulos pequeños





Fig. 2.20: (**a**–**f**) Reflectividad y (**g**–**l**) transmitancia coherente de una monocapa desordenada de partículas de silicio de radio 60 nm suspendida en el espacio libre. Se consideran ambos estados de polarización *s* y *p*, primera y segunda columna en cada caso, respectivamente. Las fracciones de cubierta usadas son (**a**, **b**, **g**, **h**) 5 %, (**c**, **d**, **i**, **j**) 10 % y (**e**, **f**, **k**, **l**) 20 %. En las gráficas de la reflectividad, la escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R^{máx}$], donde $R^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

se incrementa, haciéndose evidente que la condición de esparcimiento frontal mínimo coincide con la franja de reflectividad máxima.

Al igual que para el caso de polarización p, en polarización s la reflectividad crece conforme la fracción de cubierta aumenta [Fig. 2.20(b, d, f)]. Para el caso de polarización s, la reflectividad máxima para $\Theta = 5\%$ es 0.052, y aumenta a ~ 0.27 para $\Theta = 20\%$. Nuevamente, cerca de la condición de mínimo de esparcimiento frontal para partícula aislada, $\lambda = 487$ nm, se observan máximos de la reflectividad. Es interesante notar que al igual que para polarización p, en polarización s también existen combinaciones de parámetros (longitud de onda y ángulos de incidencia) a los cuales la reflectividad es cercana a cero, y estas regiones están cerca de la condición p, la reflectividad es mínima para polarización s sólo por debajo de los 30°, y se hace más pequeña la región en color negro conforme Θ crece. También es notorio que la zona de reflectividad mínima no presenta un corrimiento a longitudes de onda más grandes al incrementar el ángulo de incidencia, como en el caso de polarización p. Sin embargo, para $\Theta = 20\%$, al pasar de incidencia normal a 30°, sí se aprecia un ligero corrimiento (aproximadamente 10 nm) hacia el azul.

A partir de los resultados obtenidos para la reflectividad de monocapas desordenadas de partículas de silicio para ambas polarizaciones, Figs. 2.20(a–f), se concluye que la minimización del retroesparcimiento para una partícula de silicio individual es la responsable de suprimir la reflectividad de la monocapa con

fracciones de cubierta hasta del 20%, y que además es insensible al estado de polarización de la luz incidente.

La transmitancia para polarización p se muestra en las Figs. 2.20(g, i, k), considerando las mismas fracciones de cubierta que para la reflectividad: 5%, 10% y 20%, respectivamente. Para $\Theta = 5\%$ y longitudes de onda mayores a $\lambda = 570$ nm, la transmitancia es cercana a la unidad. Cabe destacar que dentro este rango de longitudes de onda, la eficiencia de extinción asociada a una partícula aislada de silicio de radio 60 nm se aproxima a cero [Fig. 2.2(a)]. Por tanto, las partículas no absorben ni esparcen luz (son transparentes) y la monocapa transmite a la luz por completo. Por otra parte, se identifican dos bandas donde la transmitancia es mínima. El comportamiento general de la transmitancia, de forma análoga a la reflectividad, se preserva y se definen mejor las bandas de transmitancia mínima al aumentar la fracción de cubierta. Conforme Θ crece, la luz que se transmite por la monocapa es cada vez menor. Es interesante notar que la transmitancia para polarización *s* es prácticamente la misma que para polarización *p*, mostrando la misma estructura. La diferencia entre ambas polarizaciones es solamente un ligero cambio en las intensidades [comparar Figs. 2.20(g–l)].

Con el propósito de estudiar con mayor detalle la relación entre la respuesta óptica obtenida para una partícula individual de silicio de radio 60 nm y la respuesta óptica de una monocapa sin soporte, se presenta la Fig. 2.21. En la gráfica superior de la Fig. 2.21(a), línea verde, se muestra la eficiencia de retroesparcimiento de una partícula individual, y se compara con la reflectividad a incidencia normal de la monocapa sin soporte para diferentes fracciones de cubierta, gráfica inferior en la Fig. 2.21(a). En estas gráficas se aprecia que la relación es directa entre las propiedades retroesparcimiento de una partícula individual y la reflectividad a incidencia normal de la monocapa. Los mínimos de la eficiencia de retroesparcimiento, localizados en $\lambda = 420$ nm y $\lambda = 559$ nm, corresponden a los mínimos de la reflectividad, al igual que los máximos (líneas verticales punteadas rosas). Al incrementar la fracción de cubierta en la monocapa, se observa que la reflectividad aumenta y se pierde la definición en los máximos, pero el mínimo de reflectividad localizado en $\lambda = 559$ nm permanece invariante. Cabe resaltar que las características de partícula individual se preservan de una mejor manera para una monocapa con una fracción de cubierta de 5 %, lo que puede atribuirse a que para $\Theta = 5$ % la separación mínima entre partículas es aproximadamente 6 veces el radio de la partícula, es decir, 360 nm, mientras que para $\Theta = 20$ % la separación promedio es cercana a 120 nm.

En la Fig. 2.21(b) se compara la eficiencia de extinción asociada a la partícula aislada (línea continua negra en la gráfica superior) con la transmitancia de la monocapa a incidencia normal para distintas fracciones de cubierta (gráficas en la figura inferior). En la eficiencia de extinción de una partícula aislada se observan dos máximos, localizados en $\lambda = 439$ nm y $\lambda = 522$ nm, que corresponden a las eficiencias de extinción debidas al dipolo eléctrico asociado al coeficiente de Mie a_1 (curva sombreada roja) y al dipolo magnético asociado al coeficiente de Mie b_1 (curva sombreada azul) inducidas en la partícula. Estos máximos en la eficiencia de extinción se corresponden con los mínimos en la transmitancia a incidencia normal y para fracciones de cubierta $\Theta = 5\%$ (línea azul obscuro), 10%, 15% y 20% (línea azul claro). A partir de estos resultados se concluye que el espectro de la transmitancia no se debe a condiciones de Kerker sino a procesos de extinción de la luz debidos a la partícula individual de silicio. Cabe mencionar que la transmitancia calculada a partir del CSM corresponde a la luz que se transmite por la monocapa sin sustrato en la dirección coherente, mientras que la extinción de una partícula individual se debe tanto a la absorción como al esparcimiento en todas direcciones. En particular, para $\lambda = 522$ nm, en el recuadro dentro de la gráfica inferior de la Fig. 2.21(b) se muestra el patrón de radiación de una partícula de silicio individual de radio 60 nm. Se considera que el vector de onda incidente viaja de izquierda a derecha, por tanto, la parte en gris del plano polar corresponde al hemisferio hacia el que se transmite la luz. En el patrón de radiación la línea naranja y la azul corresponden a cortes en los planos $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$, respectivamente. Como se puede observar, la radiación está presente en todas direcciones y no solamente en la de la transmisión coherente ($\theta = 0$).



Fig. 2.21: (a) Comparación entre la eficiencia de retroesparcimiento (línea verde en gráfica superior) de una partícula individual de Si de radio 60 nm con la reflectividad de una monocapa desordenada y sin soporte compuesta por partículas idénticas de Si de radio 60 nm, a incidencia normal. Las líneas verticales rosas indican la posición de los puntos máximos y mínimos de la reflectividad. (b) Eficiencia de extinción de una partícula individual de Si de radio 60 nm (línea negra en gráfica superior) comparada con la transmitancia coherente de la monocapa desordenada y sin soporte compuesta por partículas idénticas de Si de radio 60 nm, a incidencia normal. En la gráfica superior se incluyen las contribuciones individuales a la eficiencia de extinción de los coeficientes a_1 (zona roja) y b_1 (zona azul), así como líneas verticales punteadas negras que señalan la posición de las resonancias dipolares. Dentro de la gráfica inferior en (b) se muestra la gráfica polar del patrón de radiación de una partícula de Si de radio 60 nm para $\lambda = 522$ nm, donde la línea naranja y la azul corresponden a los planos $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$, respectivamente. Para los espectros de reflectividad y transmitancia coherente a incidencia normal se usan las fracciones de cubierta 5 % (azul claro), 10 %, 15 % y 20 % (azul obscuro).

A partir de los resultados mostrados, se concluye que las propiedades ópticas de partícula individual se preservan en las propiedades ópticas de una monocapa desordenada de partículas de silicio sin sustrato para una fracción de cubierta de $\Theta \leq 20\%$.

2.1.2 Monocapa desordenada de partículas de carburo de silicio

De forma similar a la monocapa de partículas de silicio, se estudia la respuesta óptica de una monocapa compuesta por partículas esféricas de SiC de radio 90 nm. En la Fig. 2.22 se muestran los cálculos de reflectividad (primera y segunda columna de izquierda a derecha) y transmitancia (tercera y cuarta columna de izquierda a derecha) para ambos estados de polarización. Nuevamente, se emplean las fracciones de cubierta 5 %, 10 % y 20 %. Las líneas verticales punteadas blancas indican las posiciones de $\lambda = 340$ nm [mínimo local de la eficiencia de retroesparcimiento de la partícula individual, ver Fig. 2.9(b)] y $\lambda = 549$ nm [mínimo global de la eficiencia de retroesparcimiento de la partícula individual, ver Fig. 2.9(d)]. Aunque ambas longitudes de onda se identifican como condiciones de retroesparcimiento mínimo para la partícula individual, es con $\lambda = 549$ nm donde el retroesparcimiento se aproxima a cero.

En el caso de la reflectividad de la monocapa para polarización p [Figs. 2.22(a, c, e)] se obtiene una banda alrededor de $\lambda = 549$ nm donde la reflectividad se aproxima a cero, y que, además, se conserva al aumentar la fracción de cubierta hasta 20 %. Análogamente, se observa que alrededor de $\lambda = 340$ nm,

la reflectividad es también menor a 0.01 para fracciones de cubierta hasta del 20 %. Es notorio que para $\Theta = 5$ %, la reflectividad se aproxima a cero alrededor de $\lambda = 340$ nm para ángulos de incidencia de hasta 60°, con polarización *s*, y de hasta 35°, con polarización *p*. El aumento de la fracción de cubierta causa un incremento general del valor de la reflectividad. Por ello, las zonas donde la reflectividad es menor a 0.01, se reducen y sólo permanece zonas centradas en $\lambda = 340$ nm y $\lambda = 549$ nm. Por otra parte, se obtiene que la reflectividad es máxima alrededor de $\lambda = 520$ nm para ángulos mayores a 50°.



Fig. 2.22: (a–f) Reflectividad y (g–l) transmitancia coherente de una monocapa desordenada de partículas esféricas de SiC de radio 90 nm suspendida en el espacio libre. Se consideran ambos estados de polarización s y p, primera y segunda columna en cada caso, respectivamente. Las fracciones de cubierta usadas son (a, b, g, h) 5 %, (c, d, i, j) 10 % y (e, f, k, l) 20 %. En las gráficas de la reflectividad, la escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R^{máx}$], donde $R^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

Los cálculos para polarización s, se muestran en las Figs. 2.22(b, d, f), considerando nuevamente las fracciones de cubierta $\Theta = 5\%$, $\Theta = 10\%$ y $\Theta = 20\%$. De manera análoga a la polarización p, se localizan dos franjas donde se suprime la reflectividad. Dichas franjas están centradas alrededor de las condiciones de retroesparcimiento mínimo ($\lambda = 340$ nm y $\lambda = 549$ nm). Ambas franjas se mantienen para fracciones de cubierta hasta del 20%. Para la polarización s, alrededor de $\lambda = 340$ nm, la reflectividad es menor a 0.01 para ángulos hasta 58° con $\Theta = 20\%$. Para la fracción de cubierta $\Theta = 5\%$, la reflectividad se minimiza en todo el rango angular con $\lambda = 340$ nm. Es interesante notar en las Figs 2.22(d, f), alrededor de $\lambda = 340$ nm, la reflectividad se aproxima a cero para ángulos mayores a 20°. Por otra parte, en $\lambda = 549$ nm, la reflectividad decae a cero sólo con ángulos menores a 35° de forma general para todas las fracciones de cubierta.

Por otra parte, la transmitancia de la monocapa, para ambos estados de polarización, se presenta en las Figs. 2.22(g–l). En los resultados para ambos estados de polarización se observa un comportamiento

similar en general. Se encuentra una franja de transmitancia mínima que va desde $\lambda = 350$ nm a $\lambda = 550$ nm. La franja se extiende sobre todo el rango angular, sin un corrimiento aparente al aumentar el ángulo de incidencia. Sin embargo, es apreciable para ángulos de incidencia cercanos a 60° que la transmitancia se acerca a su mínimo absoluto. Cabe destacar que, al incrementar la fracción de cubierta, la transmitancia decae a valores menores. Por ejemplo, alrededor de $\lambda = 500$ nm con polarización *p*, el mínimo de la transmitancia, para $\Theta = 5\%$ se aproxima a 0.5 alrededor de $\theta_i = 60^\circ$, mientras que para $\Theta = 20\%$ el mínimo es cercano a 0.2, para el mismo ángulo. De forma similar a la monocapa de silicio, la transmitancia para la monocapa de partículas de SiC es cercana a la unidad para longitudes de onda mayores a 800 nm, para todas las fracciones de cubierta, ya que en esta misma región espectral, la extinción de partícula aislada de SiC de radio 90 nm se aproxima a cero [ver Fig. 2.6(a)].

En la Fig. 2.23(a) se compara la eficiencia de retroesparcimiento (línea verde en la gráfica superior) y la reflectividad a incidencia normal para diferentes fracciones de cubierta (gráfica inferior). Las líneas verticales punteadas rosas indican la posición de los máximos y mínimos presentes en las curvas de la reflectividad. Dichas líneas permiten observar la correspondencia directa entre las curvas del retroesparcimiento y de reflectividad. Dentro del rango de longitudes de onda 300-1,000 nm, la partícula individual de SiC de radio 90 nm presenta un mínimo absoluto de la eficiencia de retroesparcimiento localizado alrededor de $\lambda = 549$ nm [Fig. 2.9(a)]. Alrededor de la misma longitud de onda, la reflectividad a incidencia normal se suprime, para todas las fracciones de cubierta consideradas. Por otro lado, a $\lambda = 340$ nm, la eficiencia de retroesparcimiento muestra un mínimo local, el cual se conserva en las curvas de reflectividad como un mínimo local. Tal característica se observa para todas las fracciones de cubierta. Sin embargo, el mínimo se define mejor al aumentar la fracción de cubierta. La curva de la eficiencia de retroesparcimiento también muestra dos máximos. El primero localizado alrededor de $\lambda = 377$ nm y el segundo en $\lambda = 480$ nm, siendo éste último el máximo absoluto de la curva. Al comparar con las curvas de reflectividad, se observa la presencia de máximos centrados alrededor de las mismas longitudes de onda. Como conclusión, las características del retroesparcimiento de partícula individual se preservan en la reflectividad de la monocapa de partículas. Nuevamente, para una monocapa de fracción de cubierta baja ($\Theta = 5\%$) las características del retroesparcimiento de la partícula individual se preserva de mejor manera en la reflectividad de la monocapa.

La transmitancia a incidencia normal asociada a la monocapa de partículas de SiC se compara con la eficiencia de extinción de una partícula aislada de SiC de radio 90 nm [Fig. 2.23(b)]. En la gráfica superior de la Fig. 2.23(b) se muestra la eficiencia de extinción total (línea negra) junto a las contribuciones individuales del DE (curva sombreada roja), DM (curva sombreada azul), CM (curva sombreada verde) y CE (curva sombreada amarilla). La transmitancia a incidencia normal [gráfica inferior en la Fig. 2.23(b)] se muestra para cuatro fracciones de cubierta 5 %, 10 %, 15 % y 20 %. En el espectro de la eficiencia de extinción se observan dos mínimos localizados alrededor de $\lambda = 370$ nm y $\lambda = 502$ nm (líneas verticales punteadas negras). Los máximos en la extinción se asocian con resonancias del DM y del CM, siendo la resonancia del DM la que se presenta alrededor de longitudes de onda más largas ($\lambda = 502$ nm). De forma similar al resultado obtenido con partículas de silicio, los máximos de la extinción se corresponden con los mínimos de la transmitancia. Dichos mínimos presentan ligeros corrimientos hacia el azul debido al aumento de la fracción de cubierta.

En la Fig. 2.6(f) se observa que la eficiencia de absorción de la partícula individual de SiC de radio 90 nm tiene una magnitud importante para longitudes de onda menores a $\lambda = 420$ nm. Por tanto, las partículas en la monocapa extinguen la luz no sólo por el esparcimiento en todas las direcciones, sino también por la absorción de luz. Es interesante notar que una partícula de SiC de radio 90 nm al ser iluminada con luz de longitud de onda $\lambda = 502$ nm, esparce luz en todas las direcciones; sin embargo, el esparcimiento es mayor en el hemisferio de transmisión respecto al hemisferio de reflexión [ver recuadro en la Fig. 2.23(b)].



Fig. 2.23: (a) Comparación entre la eficiencia de retroesparcimiento (línea verde en gráfica superior) de una partícula individual de SiC de radio 90 nm con la reflectividad de una monocapa desordenada y sin soporte compuesta por partículas idénticas de SiC de radio 90 nm, a incidencia normal. Las líneas verticales rosas indican la posición de los puntos máximos y mínimos de la reflectividad. (b) Eficiencia de extinción de una partícula individual de SiC de radio 90 nm (línea negra en gráfica superior) comparada con la transmitancia coherente de la monocapa desordenada y sin soporte compuesta por partículas idénticas de SiC de radio 90 nm, a incidencia normal. En la gráfica superior se incluyen las contribuciones individuales a la eficiencia de extinción de los coeficientes a_1 (zona roja), b_1 (zona azul), b_2 (zona verde) y a_2 (zona amarilla), así como líneas verticales punteadas negras que señalan la posición de las resonancias de los coeficientes b_1 y b_2 . Dentro de la gráfica inferior en (b) se muestra la gráfica polar del patrón de radiación de una partícula de SiC de radio 90 nm para $\lambda = 502$ nm, donde la línea naranja y la azul corresponden a los planos $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$, respectivamente. Para los espectros de reflectividad y transmitancia coherente a incidencia normal se usan las fracciones de cubierta 5 % (azul claro), 10 %, 15 % y 20 % (azul obscuro).

En resumen, las propiedades ópticas de una monocapa compuesta de partículas dieléctricas (en particular de silicio y de SiC), conservan características de las propiedades ópticas de la partícula individual, considerando fracciones de cubierta iguales o menores a 20 %. Específicamente, la extinción (por esparcimiento y por absorción) de la partícula aislada se asocia de manera directa con el comportamiento de la transmitancia de la monocapa, mientras que la reflectividad conserva características de la eficiencia de retroesparcimiento. Uno de los resultados más notorios es que el mínimo de retroesparcimiento en la partícula individual coincide con un mínimo de la reflectividad. A continuación se estudiará el comportamiento de monocapas compuestas por partículas con respuesta metálica, con el fin de determinar si la condición generalizada de Kerker de partícula aislada también se mantiene como un mínimo de reflectividad de una monocapa. Al igual que en sus análogos dieléctricos, se utilizará el radio de partícula para los que ya se identificaron condiciones tipo Kerker en la sección 1 de este capítulo.

2.1.3 Monocapa desordenada de partículas de oro

A continuación se estudia la respuesta óptica de una monocapa compuesta de partículas de oro de radio 130 nm suspendida en el espacio libre. En la Fig. 2.24 se muestra la reflectividad y transmitancia para ambos estados de polarización, considerando tres fracciones de cubierta: 5%, 10% y 20%. La línea blanca localizada en $\lambda = 527$ nm corresponde al mínimo de retroesparcimiento para la partícula individual.

La reflectividad para polarización p se muestra en la primera columna (de izquierda a derecha) de la Fig. 2.24. Para las fracciones de cubierta consideradas se obtienen zonas dentro de las cuales la reflectividad es menor a 0.01. En particular, con $\Theta = 5\%$, la reflectividad es mayor al 0.01 sólo para longitudes de onda entre $\lambda = 790$ nm y $\lambda = 1,000$ nm y con ángulos menores a 16°. El incremento de la fracción de cubierta produce un aumento en la reflectividad de forma global, por lo que las regiones de reflectividad menor a 0.01 reducen su tamaño. Al igual que en las monocapas de partículas dieléctricas, hasta fracciones de cubierta del 20%, se preserva una franja donde la reflectividad se suprime; en este caso localizada alrededor de $\lambda = 527$ nm. Dicha franja se extiende hasta $\theta_i = 12^\circ$, para $\Theta = 20\%$, mientras que con fracciones de cubierta menores, 5% y 10%, su rango angular aumenta y se observa hasta 20° y 14°, respectivamente. Es interesante notar que al incrementar el ángulo de incidencia, no se observa un corrimiento visible de la franja de reflectividad mínima, que tiene valores menores a 0.05 para $\lambda = 527$ nm.



Fig. 2.24: (**a**–**f**) Reflectividad y (**g**–**l**) transmitancia coherente de una monocapa desordenada de partículas esféricas de oro de radio 130 nm suspendida en el espacio libre. Se consideran ambos estados de polarización *s* y *p*, primera y segunda columna en cada caso, respectivamente. Las fracciones de cubierta usadas son (**a**, **b**, **g**, **h**) 5%, (**c**, **d**, **i**, **j**) 10% y (**e**, **f**, **k**, **l**) 20%. En las gráficas de la reflectividad, la escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R^{máx}$], donde $R^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

Para la polarización s se obtienen resultados similares que para la polarización p. Sin embargo, de forma general, se observa que las zonas de reflectividad menor a 0.01 se presentan para longitudes de onda menores a $\lambda = 800$ nm, mientras que con la polarización p se puede lograr hasta $\lambda = 1,000$ nm. Se observa que para longitudes de onda menores a $\lambda = 560$ nm la reflectividad no sobrepasa el valor 0.01. Al disminuir la fracción de cubierta, el rango espectral de la zona de mínima reflectividad aumenta. Estas zonas se extienden en un rango amplio del ángulo de incidencia. Por mencionar un ejemplo, con $\Theta = 5\%$, para longitudes de onda entre $\lambda = 300$ nm y $\lambda = 480$ nm la reflectividad es menor a 0.01

para ángulos hasta 60° . Es importante notar que alrededor de $\lambda = 527$ nm (línea punteada blanca) la reflectividad se aproxima a cero para ángulos de hasta 20° con fracciones de cubierta de hasta 20° . Con fracciones de cubierta menores, la reflectividad se suprime alrededor de $\lambda = 527$ nm, para un rango de ángulos de incidencia mayor. Por ejemplo, con $\Theta = 5^{\circ}$, se suprime hasta $\theta_i = 32^{\circ}$, aproximadamente. Sin embargo cabe resaltar que para ángulos mayores la reflectividad a $\lambda = 527$ nm, no sobrepasa el valor 0.015. Por tanto, en la monocapa de oro se observa que la condición de mínimo retroesparcimiento para una partícula individual de oro se traduce en la monocapa como un mínimo de reflectividad. Cabe resaltar que la condición del mínimo de la reflectividad no muestra un corrimiento aparente al aumentar el ángulo de incidencia como se aprecia en las monocapas de partículas de silicio o SiC. Además, el mínimo de la reflectividad es insensible al estado de polarización incidente.

La transmitancia de la monocapa de partículas de oro se muestra en las Figs. 2.24(g–l), en función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia. Se observa un comportamiento monótono al variar la fracción de cubierta y sólo hay cambios significativos en la magnitud de la transmitancia. Es notorio que alrededor de $\lambda = 525$ nm se observa un mínimo de la transmitancia. Para la monocapa con $\Theta = 5\%$, el valor mínimo obtenido es ~ 0.7, y con $\Theta = 10\%$ desciende hasta 0.4, mientras que con $\Theta = 20\%$ a 0.25. Con las fracciones de cubierta, el tamaño de la partícula y los rangos de longitud de onda y ángulo incidente considerados, no se logra suprimir la transmisión coherente de la monocapa para ninguna de las polarizaciones, como se observó para monocapas de partículas de silicio y carburo de silicio. De acuerdo a la eficiencia de esparcimiento frontal obtenida para una partícula aislada de oro de 130 nm [Fig. 2.14(a)], dentro del rango espectral de longitudes de onda considerado, no se alcanza un valor cercano a cero. Aunque el resultado es similar para ambas polarizaciones, para la polarización *p* el mínimo es más pronunciado y ancho.

En la Fig. 2.25(a) se muestra la comparación de las eficiencias de retroesparcimiento (línea verde) con la reflectividad en incidencia normal, considerando las fracciones de cubierta 5 %, 10 %, 15 % y 20 %. La línea vertical punteada rosa en $\lambda = 527$ nm señala la posición de la condición de retroesparcimiento mínimo para la partícula de oro de radio 130 nm. Las curvas de reflectividad muestran un mínimo alrededor de $\lambda = 527$ nm, que está presente al variar la fracción de cubierta hasta 20 %. Para longitudes de onda mayores a $\lambda = 527$ nm, la reflectividad aumenta su valor, en particular, con $\Theta = 20\%$ llega $a \sim 0.122$. Es interesante notar que en la curva de eficiencia de retroesparcimiento se observan dos máximos, uno alrededor de $\lambda = 395$ nm y el absoluto cerca de $\lambda = 780$ nm (indicadas con líneas verticales punteadas rosas). El máximo de menor magnitud se relaciona con un ligero incremento de reflectividad presente alrededor de la misma longitud de onda. En cambio, para el máximo alrededor de $\lambda = 780$ nm, se observa que el máximo de reflectividad está desplazado hacia el rojo. En la Fig. 2.25(b) se muestran gráficas para la eficiencia de extinción (línea negra en la gráfica superior) y la transmitancia a incidencia normal (gráfica inferior), para diferentes valores de la fracción de cubierta. En la eficiencia de extinción se indican las contribuciones individuales del DE (curva sombreada roja) y CE (curva sombreada verde). El máximo absoluto de la eficiencia de extinción ($\lambda = 525$ nm) se asocia a la resonancia del CE. La línea vertical punteada negra indica la posición del máximo de la eficiencia de extinción y se observa que coincide con el mínimo del espectro de transmitancia a incidencia normal. El mínimo en la transmitancia se define mejor conforme se aumenta la fracción de cubierta. Para $\Theta = 20\%$, la transmitancia alcanza sus valores más bajos. Cabe destacar que en la monocapa de partículas de oro no se observa una longitud de onda donde la transmitancia sea cercana a la unidad, como se obtiene para las monocapas de partículas dieléctricas, o bien que se logre suprimir.

Una partícula esférica de oro de radio 130 nm extingue la luz tanto por absorción como por esparcimiento de la luz [ver Fig. 2.11(b) y Fig. 2.12(a)]. La eficiencia de esparcimiento para un radio igual a 130 nm es distinta a cero para longitudes de onda menores a ~ 560 nm, mientras que el esparcimiento es distinto a cero para todo el intervalo espectral entre 300 y 1,000 nm. En particular, dentro del recuadro en la gráfica inferior de la Fig. 2.25(b), se muestra el patrón de radiación de la partícula individual



Fig. 2.25: (a) Comparación entre la eficiencia de retroesparcimiento (línea verde en gráfica superior) de una partícula individual de Au de radio 130 nm con la reflectividad de una monocapa desordenada y sin soporte compuesta por partículas idénticas de Au de radio 130 nm, a incidencia normal. Las líneas verticales rosas indican la posición de los puntos máximos y mínimos de la reflectividad. (b) Eficiencia de extinción de una partícula individual de Au de radio 130 nm (línea negra en gráfica superior) comparada con la transmitancia coherente de la monocapa desordenada y sin soporte compuesta por partículas idénticas de Au de radio 130 nm, a incidencia normal. En la gráfica superior se incluyen las contribuciones individuales a la eficiencia de extinción de los coeficientes a_1 (zona roja) y a_2 (zona verde), así como una línea vertical punteada negra que señala la posición de la resonancia del coeficiente a_2 . Dentro de la gráfica inferior en (b) se muestra la gráfica polar del patrón de radiación de una partícula de Au de radio 130 nm para $\lambda = 525$ nm, donde la línea naranja y la azul corresponden a los planos $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$, respectivamente. Para los espectros de reflectividad y transmitancia coherente a incidencia normal se usan las fracciones de cubierta 5 % (azul claro), 10 % y 20 % (azul obscuro).

para $\lambda = 525$ nm, y se observa que el retroesparcimiento es prácticamente nulo. Cabe mencionar que el mínimo de la transmitancia es cercano a la condición de retroesparcimiento nulo de la partícula individual ($\lambda = 527$ nm). Las líneas naranja y azul en el patrón de radiación corresponden a cortes en los planos $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$. La forma del patrón se debe a la interferencia entre el DE y CE, por ello, la direccionalidad es mayor. Por tanto, hay menos luz esparcida en direcciones distintas a la coherente.

2.1.4 Monocapa desordenada de partículas de bismuto

Por último, se estudia la respuesta óptica de una monocapa compuesta por partículas esféricas idénticas de bismuto, de radio 130 nm y sin sustrato. En la Fig. 2.26 se muestran tanto la reflectividad como la transmitancia. La reflectividad para polarización p se muestra en las gráficas de la Figs. 2.26(a, c, e) para diferentes fracciones de cubierta: 5%, 10% y 20%. La línea vertical blanca indica la condición de retroesparcimiento mínimo de una partícula aislada, localizado en $\lambda = 490$ nm [ver Fig. 2.19(a)]. De forma similar a la monocapa de partículas de oro, para $\Theta = 5\%$, la reflectividad es menor a 0.01 a excepción de una pequeña región en el intervalo espectral 820–1,000 nm y sólo para ángulos menores a 13°. Conforme aumenta la fracción de cubierta, se reduce el tamaño de las zonas donde la reflectividad es menor a 0.01, debido al incremento general de la reflectividad de la monocapa. El máximo de reflectividad obtenido dentro de los rangos espectral y angular analizado, para la monocapa con $\Theta = 20\%$, es aproximadamente tres veces mayor al máximo obtenido con la monocapa de $\Theta = 10\%$,

y casi diez veces mayor al de la monocapa con $\Theta = 5$ %. De forma consistente a los resultados obtenidos para los otros materiales analizados, se observa que alrededor de la condición de retroesparcimiento mínimo $\lambda = 490$ nm, la reflectividad se suprime para ángulos de incidencia menores a 20 %. Considerando polarización s [Figs. 2.26(b, d, f)] también se observa que alrededor de la condición de retroesparcimiento mínimo hay una banda dentro de la cual la reflectividad se aproxima a cero, que se aprecia hasta ángulos cercanos a 30° y se recorre hacia el azul cuando se incrementa el valor del ángulo de incidencia. Para



Fig. 2.26: (a–f) Reflectividad y (g–l) transmitancia coherente de una monocapa desordenada de partículas esféricas de bismuto de radio 130 nm suspendida en el espacio libre. Se consideran ambos estados de polarización s y p, primera y segunda columna en cada caso, respectivamente. Las fracciones de cubierta usadas son (a, b, g, h) 5 %, (c, d, i, j) 10 % y (e, f, k, l) 20 %. En las gráficas de la reflectividad, la escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R^{máx}$], donde $R^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

la longitud de onda $\lambda = 527$ nm (línea vertical punteada blanca), se obtiene que la reflectividad no sobrepasa el valor 0.05 para ángulos de hasta 60°. En las Figs. 2.26(g, i, k) se muestran los resultados de la transmitancia para polarización *p*, mientras que en las Figs. 2.26(h, j, l) se muestran para la polarización *s*. Se observa la presencia de un mínimo bien definido desplazado hacia el azul respecto a la condición de retroesparcimiento mínimo (línea punteada blanca en la Fig. 2.26). Al incrementar el valor de la fracción de cubierta, la transmitancia decae en forma general. Al comparar los mínimos obtenidos para las monocapas con $\Theta = 5\%$ y $\Theta = 20\%$, se obtiene que para la fracción de cubierta mayor el mínimo es aproximadamente 2.6 veces menor que para $\Theta = 5\%$, considerando polarización *p*. Para la polarización *s* el comportamiento es similar a los resultados obtenidos con polarización *p*.

En la Fig. 2.27(a) se compara la eficiencia de retroesparcimiento de partícula aislada con la reflectividad de la monocapa a incidencia normal. La línea vertical punteada rosa indica la posición de la condición de retroesparcimiento mínimo, localizada en $\lambda = 490$ nm, y se observa que coincide con el mínimo de la reflectividad, sin importar el valor de la fracción de cubierta. Por tanto, el mínimo de retroesparcimiento

de la partícula de bismuto de radio 130 nm se conserva como un mínimo de reflectividad de la monocapa sin sustrato. Al aumentar la longitud de onda, la reflectividad incrementa su valor. De forma similar a la monocapa de oro, los máximos de retroesparcimiento de partícula aislada, pueden asociarse con máximos en el espectro de reflectividad. Sin embargo, el máximo de reflectividad cercano a $\lambda = 790$ nm está corrido hacia el azul respecto al máximo de la reflectividad. Además, es posible observar que al incrementar la fracción de cubierta, la diferencia con el valor máximo de la reflectividad es cada vez mayor. Al comparar la eficiencia de extinción de una partícula de Bi de radio 130 nm [gráfica superior



Fig. 2.27: (a) Comparación entre la eficiencia de retroesparcimiento (línea verde en gráfica superior) de una partícula individual de Bi de radio 130 nm con la reflectividad de una monocapa desordenada y sin soporte compuesta por partículas idénticas de Bi de radio 130 nm, a incidencia normal. Las líneas verticales rosas indican la posición de los puntos máximos y mínimos de la reflectividad. (b) Eficiencia de extinción de una partícula individual de Bi de radio 130 nm (línea negra en gráfica superior) comparada con la transmitancia coherente de la monocapa desordenada y sin soporte compuesta por partículas idénticas de Bi de radio 130 nm, a incidencia normal. En la gráfica superior se incluyen las contribuciones individuales a la eficiencia de extinción de los coeficientes a_1 (zona roja) y a_2 (zona verde), así como una línea vertical punteada negra que señala la posición de la resonancia del coeficiente a_2 . Dentro de la gráfica inferior en (b) se muestra la gráfica polar del patrón de radiación de una partícula de Bi de radio 130 nm para $\lambda = 440$ nm, donde la línea naranja y la azul corresponden a los planos $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$, respectivamente. Para los espectros de reflectividad y transmitancia coherente a incidencia normal se usan las fracciones de cubierta 5 % (azul claro), 10 %, 15 % y 20 % (azul obscuro).

en la Fig. 2.27(b)] con el espectro de la transmitancia a incidencia normal para la monocapa [gráfica inferior en la Fig. 2.27(b)], se localiza que el mínimo de transmitancia corresponde a una resonancia de la extinción. En particular, dicha resonancia corresponde al CE [curva verde en la Fig. 2.27(b)]. Es interesante notar que para $\lambda = 440$ nm (línea vertical punteada negra, la contribución del CE es aproximadamente dos veces mayor a la contribución del DE [curva roja en la Fig. 2.27(b)], en contraste con el caso del oro, en donde ambas contribuciones son similares en magnitud. En la Fig. 2.27(b), para $\lambda = 525$ nm (mínimo de la eficiencia de retroesparcimiento y máximo en la transmitancia), la contribución del DE es aproximadamente 1.2 veces mayor a la del CE.

De los resultados presentados en esta sección, se concluye que las propiedades ópticas de una partícula individual se preservan en un arreglo desordenado de partículas tanto para partículas dieléctricas como con respuesta metálica. En particular, se observó que los mínimos de reflectividad tienen su origen en la minimización del retroesparcimiento de la partícula individual, debido a interferencia de diferentes

modos multipolares inducidos en las partículas, es decir, efectos tipo Kerker. Vale la pena señalar que esto es válido para ambas polarizaciones y se aprecia de mejor manera para ángulos de incidencia bajos ($\sim 20^{\circ}$). Por otra parte, la transmitancia coherente de la monocapa se entiende a partir de las propiedades de extinción de partícula aislada, y por tanto no tiene relación con efectos tipo Kerker.

2.2 Monocapa desordenada soportada sobre un sustrato

En las secciones anteriores se estudiaron las propiedades ópticas de partículas individuales y se logró establecer una conexión con la respuesta óptica de una monocapa aleatoria de partículas idénticas sin considerar el sustrato. Se obtuvieron combinaciones de parámetros para la longitud de onda y el ángulo de incidencia con los cuales se mostró que se puede suprimir la reflectividad de manera eficiente. Sin embargo, una monocapa suspendida en el espacio libre no es un sistema realista, por lo que es preciso considerar un sustrato y su efecto en las propiedades ópticas del sistema. En esta sección se analizarán dos sustratos dieléctricos: vidrio, cuyo índice de refracción se considera constante $n_s = 1.5$, y silicio considerando los datos para el índice de refracción de la referencia [87]. Nuevamente, se analiza el intervalo de longitud de onda entre 300 nm y 1,000 nm, con el rango angular 0–60° para el ángulo de incidencia. Con el fin de estudiar el efecto del sustrato, las reflectividades obtenidas con las monocapas previamente estudiadas (sin sustrato) se compararán con las calculadas para las monocapas soportadas.

2.2.1 Monocapa desordenada soportada de partículas de silicio

A continuación se presentan los resultados obtenidos en cuanto a la reflectividad asociada a una monocapa de partículas de silicio de radio 60 nm, soportada sobre un sustrato dieléctrico (vidrio o silicio). Primero, se analiza el caso de polarización p y, posteriormente, el de polarización s. En ambos casos se estudian fracciones de cubierta de 5 %, 10 %, 15 % y 20 %. Los resultados se comparan con los obtenidos previamente para la monocapa suspendida en el espacio libre. En la Fig. 2.28 se muestran los cálculos de la reflectividad para el estado de polarización p. En el renglón superior [Figs. 2.28(a-d)] se retoma el caso de la monocapa soportada en el espacio libre, cuya característica principal es el mínimo de reflectividad alrededor de $\lambda = 559$ nm, presente en monocapas con fracciones de cubierta de hasta 20 %. En el renglón central [Figs. 2.28(e-h)] se muestran los cálculos para la misma monocapa pero soportada sobre el sustrato de vidrio. Las zonas de reflectividad mínima ($R_p < 0.01$) cambian de posición y tamaño espectral respecto al caso de la monocapa soportada en el espacio libre. Se observa que para longitudes de onda menores a $\lambda = 500$ nm, la reflectividad de la metasuperficie sobre un sustrato de vidrio se aproxima a valores menores a 0.01 para todas las fracciones de cubierta. Sin embargo, al incrementar el valor de Θ , la región disminuye su tamaño y ya no se logran valores de reflectividad próximos a cero. Por otro lado, es interesante notar que a partir de $\Theta = 15$ %, la reflectividad disminuye su valor a ~ 0.01 para longitudes de onda mayores a $\lambda = 550$ nm. En particular, con $\Theta = 20$ %, la reflectividad R_p es menor que 0.01 dentro del intervalo espectral 580-790 nm, para ángulos de incidencia de hasta 30°.

Por otra parte, cabe mencionar que para la metasuperficie con sustrato de vidrio y fracciones de cubierta mayores a 10 %, aparece una región donde la reflectividad de la metasuperficie es menor a 0.01 que se extiende entre $\lambda = 615$ nm y $\lambda = 660$ nm para $\Theta = 15$ % y ángulos de incidencia menores a 10°, y entre $\lambda = 585$ nm y $\lambda = 790$ nm para $\Theta = 20$ % y ángulos de incidencia menores a 30°. A partir del análisis de la monocapa soportada en el espacio libre, se puede concluir que la aparición de estas zonas de baja reflectividad está relacionada con la interferencia entre los dipolos eléctrico y magnético inducidos en cada partícula. En general, el efecto del sustrato de vidrio es producir un corrimiento hacia el rojo de todo el espectro respecto a la monocapa soportada en el espacio libre. Se puede notar que para $\Theta = 15$ % [Fig. 2.28g)] y $\Theta = 20$ % [Fig. 2.28(h)], dentro del intervalo 550–700 nm, la reflectividad disminuye respecto a fracciones de cubierta menores. En particular, con $\Theta = 20$ %, disminuye a valores cercanos a 0.15, mientras que con $\Theta = 5$ % es cercana a 0.32. Un aspecto interesante observado en la Fig. 2.28,

Reflectividad y transmitancia en metasuperficies desordenadas



Fig. 2.28: Reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de silicio de radio 60 nm (**a–d**) suspendida en el espacio libre, (**e–h**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**i–l**) soportada sobre un sustrato de silicio, considerando polarización *p*. Los cálculos se realizan para las fracciones de cubierta $\Theta = 5\%$, 10%, 15% y 20%. La escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R_p^{máx}$], donde $R_p^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

es que al comparar la banda dentro de la cual la reflectividad es máxima en la monocapa soportada en el espacio libre, ésta última parece mantener su posición alrededor de $\lambda = 520$ nm, aproximadamente, considerando el sustrato de vidrio.

Al compararse la reflectividad de la monocapa soportada en el espacio libre con la monocapa soportada sobre un sustrato de silicio [Figs. 2.28(i–l)], se observa que para obtener valores de reflectividad menores a 0.01 se necesitan fracciones de cubierta mayores a 10 %. Incluso con $\Theta = 20$ %, no se logra una región amplia de reflectividad mínima. Es notorio que la adición del sustrato reduce el intervalo espectral dentro del cual la reflectividad de la metasuperficie es mínima. A diferencia del resultado obtenido con el sustrato de vidrio, el aumento de la fracción de cubierta no implica un aumento de la reflectividad necesariamente. En las Figs. 2.28(i–l) se obtiene que el máximo de reflectividad obtenido dentro de los parámetros estudiados disminuye para fracciones de cubierta entre $\Theta = 10$ % y $\Theta = 15$ %, sin embargo, con $\Theta = 20$ %, el máximo obtenido (~ 0.44) aumenta. Cabe mencionar que para la metasuperficie con $\Theta = 20$ %, la región de reflectancia menor a 0.01 se extiende en intervalos tanto angular y como espectral mayores en comparación a fracciones de cubierta menores.

Para el estado de polarización *s* se obtuvieron las gráficas de reflectividad mostradas en la Fig. 2.29. Nuevamente se compara entre la monocapa soportada en el espacio libre [Figs. 2.29(a–d)] respecto a la monocapa sobre vidrio [Figs. 2.29(e–h)] y silicio [Figs. 2.29(i–l)]. Como se analizó anteriormente, la condición de retroesparcimiento mínimo de partícula aislada, que se traduce en una cancelación de la reflectividad en la monocapa soportada en el espacio libre, se encuentra alrededor de $\lambda = 559$ nm. La

reflectividad de la metasuperficie con sustrato de vidrio, para fracciones de cubierta mayores a 15%, muestra una zona de reflectividad mínima para longitudes de onda mayores a $\lambda = 500$ nm. En las Figs. 2.29(g, h), la región presenta un ancho espectral distinto y ambas sufren un corrimiento hacia el azul al aumentar el ángulo de incidencia. En particular, con $\Theta = 15\%$ y para ángulos menores a 20°, la franja de reflectividad mínima se extiende dentro del intervalo 615–660 nm. En cambio, con $\Theta = 20\%$, se encuentra en el intervalo 590–790 nm. Dichos intervalos, se asemejan a los observados para polarización p, con las mismas fracciones de cubierta. En los resultados del sustrato de silicio, para las fracciones de cubierta del 15 % [Fig. 2.29(k)] y 20\% [Fig. 2.29(l)], no se observa una disminución considerable de la reflectividad para los rangos espectrales 615–660 nm y 590–790 nm, respectivamente. Por otra parte, para longitudes de onda menores a 500 nm, se observan regiones de reflectividad mínima con el sustrato de vidrio y fracciones de cubierta mayores o igual al 10\%. En el caso del sustrato de silicio, la reflectividad decae a valores menores a 0.01 sólo para fracciones de cubierta mayores a 15\% y en regiones muy limitadas tanto de longitudes de onda como de ángulos de incidencia.



Fig. 2.29: Reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de silicio de radio 60 nm (**a**–**d**) suspendida en el espacio libre, (**e**–**h**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**i**–**l**) soportada sobre un sustrato de silicio, considerando polarización *s*. El cálculo se realiza para las fracciones de cubierta $\Theta = 5\%$, 10%, 15% y 20%. La escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R_s^{máx}$], donde $R_s^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

Con el propósito de complementar el estudio de la reflectividad de la metasuperficie, se realizaron cálculos a incidencia normal para cuatro fracciones de cubierta entre 5% (línea azul) y 20% (línea amarilla). En la Fig. 2.30(a) se muestra la reflectividad para el caso de monocapa soportada en el espacio libre, mientras que en la Fig. 2.30(b) y la Fig. 2.30(c) se muestran los resultados para las monocapas soportadas en sustratos de vidrio y silicio, respectivamente. Asimismo, se grafica la reflectividad del sustrato sin monocapa (líneas negras). Se observa que la reflectividad de la metasuperficie soportada en un sustrato de vidrio tiene un mínimo en $\lambda = 605$ nm con $\Theta = 20\%$. Este mínimo pierde definición



Fig. 2.30: Reflectividad de una monocapa compuesta de partículas esféricas idénticas de silicio de radio 60 nm (**a**) suspendida en el espacio libre (FSM), (**b**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**c**) soportada sobre un sustrato de silicio, para incidencia normal. Se analizan cuatro fracciones de cubierta: 5% (línea azul), 10%, 15% y 20% (línea amarilla). En las gráficas en (**b**) y (**c**) se agrega la reflectividad del sustrato de vidrio o silicio, respectivamente, sin la monocapa (línea negra).

al disminuir la fracción de cubierta. Por otra parte, es importante señalar que para esta fracción de cubierta ($\Theta = 20 \%$) aparece un mínimo en $\lambda = 400$ nm y, cuando la fracción de cubierta disminuye a $\Theta = 5 \%$, aparece una ventana entre $\lambda = 440$ nm y $\lambda = 600$ nm donde la reflectividad es cercana a cero. Es interesante notar que los máximos de la curva de reflectividad aumentan su magnitud conforme se incrementa la fracción de cubierta. Sin embargo, para longitudes de onda mayores a $\lambda = 550$ nm, el aumento de la fracción de cubierta conlleva una disminución de la reflectividad. De forma similar, se observa que la reflectividad de la metasuperficie soportada sobre un sustrato de silicio disminuye conforme se incrementa la fracción de cubierta. Incluso, se obtiene que la reflectividad es siempre menor a la del sustrato sin partículas. Esto difiere de los resultados obtenidos para la monocapa soportada en un sustrato de vidrio, donde sólo para $\Theta = 5 \%$ [Fig. 2.30(c)] se localizan dos mínimos en $\lambda = 440$ nm y $\lambda = 520$ nm. También se observa que al incrementar la fracción de cubierta ambos mínimos se corren hacia el azul y disminuye la reflectividad. Es interesante notar que para $\Theta = 20 \%$, la reflectividad se aproxima a cero dentro del intervalo espectral 460–485 nm.

Por último, se presenta un breve análisis de la transmitancia asociada a la metasuperficie soportada. En la sección anterior se observó que la transmitancia de la monocapa de partículas suspendida en el espacio libre no sufre cambios considerables debidos a variaciones de la fracción de cubierta. Al analizar la transmitancia considerando el sustrato, se obtuvo un resultado similar. Por ello se decidió enfocar el análisis en una fracción de cubierta del 20%, donde los efectos se ven más claramente. En la Fig. 2.31 se compara la transmitancia de la monocapa soportada en el espacio libre con la de la monocapa soportada sobre vidrio y sobre silicio, para ambos estados de polarización. De forma análoga a lo ya observado con la monocapa soportada en el espacio libre, se obtienen franjas donde la transmitancia decae. En particular, en el sustrato de vidrio [Figs. 2.31(c, d)] se observan dos mínimos principales localizados alrededor de $\lambda = 430$ nm y $\lambda = 510$ nm. Por otro lado, para el sustrato de silicio [Figs. 2.31(e, f)] se obtiene que los mínimos están alrededor de $\lambda = 435$ nm y $\lambda = 520$ nm, además, dentro del intervalo 300–390 nm la transmitancia también es baja. Cabe destacar que para ninguno de los casos, los mínimos presentan un corrimiento aparente debido al aumento en el ángulo de incidencia y se observa que la reflectividad para polarización s es ligeramente menor que para la polarización p. Además, para la monocapa con el sustrato de vidrio, para longitudes de onda mayores a $\lambda = 650$ nm, la transmitancia se aproxima a la unidad, mientras que con silicio no sobrepasa el valor 0.8.

2.2.2 Monocapa desordenada de partículas de carburo de silicio

La reflectividad de una monocapa de esferas de carburo de silicio (SiC) de radio 90 nm soportada sobre vidrio o silicio, para polarización *p*, se muestra en la Fig. 2.32. Nuevamente se consideraron fracciones



Fig. 2.31: Comparación de la transmitancia coherente de una monocapa de partículas esféricas de silicio de radio 60 nm (a, b) suspendida en el espacio libre, soportada en un sustrato de (c, d) vidrio y (e, f) silicio. Para los cálculos se considera la fracción de cubierta $\Theta = 20\%$ y ambos estados de polarización.

de cubierta de 5%, 10%, 15% y 20%. Con fines comparativos, en el renglón superior de la Fig. 2.32 [Figs. 2.32(a–d)] se muestran los cálculos de reflectividad para la monocapa soportada en el espacio libre de partículas esféricas de SiC de radio 90 nm. Alrededor de $\lambda = 549$ nm, condición de retroesparcimiento mínimo para partícula individual, la reflectividad a incidencia normal de la monocapa soportada en el espacio libre se suprime para fracciones de cubierta hasta del 20%. Como se discutió anteriormente, para longitudes de onda menores a $\lambda = 400$ nm, se obtienen regiones donde la reflectividad es mínima, es decir, $R_n < 0.01$. Así mismo, dentro del intervalo angular 40–60° se observa un aumento de la reflectividad para longitudes de onda entre $\lambda = 450$ nm y $\lambda = 700$ nm. El caso de la reflectividad asociada a la monocapa de partículas esféricas de SiC soportada en un sustrato de vidrio se muestra en las Figs. 2.32(e-h), considerando las mismas fracciones de cubierta que en la monocapa soportada en el espacio libre. Una de las características observadas es que para todas las fracciones de cubierta estudiadas se encuentran regiones donde $R_p < 0.01$. En particular, para longitudes de onda menores a $\lambda = 500$ nm se observa una franja de reflectividad mínima, cuya extensión en el intervalo angular cambia en función de la fracción de cubierta, pero que se encuentra siempre presente. Por otra parte, en las metasuperficies con $\Theta \geq 15\,\%$ [ver Figs. 2.32(g) y 2.32(h)], la reflectividad decae a valores menores a 0.01 para longitudes de onda dentro del intervalo 560–900 nm y ángulos de incidencia menores a 40°. En particular, con $\Theta = 20$ %, la reflectividad se aproxima a cero dentro del rango $\lambda = 600$ nm y $\lambda = 800$ nm con ángulos de incidencia menores a 20° . En lo que respecta a la monocapa soportada sobre un sustrato de silicio [Figs 2.32(i–l)], R_n no es menor al 0.01 para ningún valor de fracción de cubierta entre 5 % y 20 %. Sin embargo, se observa una franja espectral 350-500 nm dentro de la cual la reflectividad tiene valores entre 0.01 y 0.1. A partir de $\Theta = 10$ %, el mínimo de la reflectividad se extiende dentro de todo el intervalo angular estudiado, mientras que para $\Theta = 5\%$ sólo aparece para ángulos de incidencia mayores a 35°. Respecto a los máximos en la reflectividad, se observa que con el sustrato de vidrio la banda de máximos no presenta un corrimiento aparente respecto al resultado de la monocapa soportada en el espacio libre, mientras que con el sustrato de silicio hay un ensanchamiento notable.

En el caso del estado de polarización *s*, la reflectividad para la monocapa soportada en el espacio libre compuesta de partículas de SiC de radio 90 nm [Figs. 2.33(a-d)] muestra al menos dos regiones



Fig. 2.32: Reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de SiC de radio 90 nm (**a–d**) suspendida en el espacio libre, (**e–h**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**i–l**) sobre un sustrato de silicio, considerando polarización *p*. El cálculo se realiza para las fracciones de cubierta $\Theta = 5 \%$, 10 %, 15 % y 20 %. La escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R_p^{máx}$], donde $R_p^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

donde su valor es menor a 0.01, que se mantienen para fracciones de cubierta hasta 20 %. Las regiones se localizan alrededor de $\lambda = 340$ nm y $\lambda = 549$ nm. Los resultados para un sustrato de vidrio se muestran en las Figs. 2.33(e–h), y se observa que para fracciones de cubierta mayores al 5 % aparecen regiones de reflectividad mínima. En particular, con $\Theta = 10$ %, la reflectividad es menor a 0.01 para longitudes de onda entre $\lambda = 360$ nm y $\lambda = 460$ nm, para ángulos mayores a 20°. Cabe mencionar que la reflectividad también es menor a 0.01 para longitudes de onda mayores a 600 nm cuando Θ es mayor o igual a 15 %. Particularmente, la reflectividad de la metasuperficie con $\Theta = 20$ % muestra una región donde $R_s < 0.01$ que abarca el intervalo espectral 600–800 nm, para ángulos menores a 30°, y se corre ligeramente al azul al aumentar el ángulo de incidencia.

A diferencia del resultado para la polarización p, considerando un sustrato de silicio con polarización s [Figs. 2.33(i–l)], es posible identificar regiones donde $R_s \leq 0.01$ para fracciones de cubierta mayores a 15%. En las Figs. 2.33(k, l), se observa que la reflectividad decae a valores menores a 0.01 para ángulos de incidencia mayores a 20° y que la zona se corre al rojo al incrementar el valor del ángulo de incidencia. Sin embargo, es interesante notar que para ángulos de incidencia menores, la reflectividad no sobrepasa a ~ 0.05 entre $\lambda = 360$ nm y $\lambda = 500$ nm. Se observa también que en la metasuperficie con $\Theta = 10\%$, la reflectividad muestra una franja donde su valor es cercano a 0.02, y que se extiende en todo el rango angular para las longitudes de onda entre $\lambda = 380$ nm y $\lambda = 520$ nm, sufriendo un corrimiento al rojo debido al incremento del ángulo.



Fig. 2.33: Reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de SiC de radio 90 nm (**a–d**) suspendida en el espacio libre, (**e–h**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**i–l**) soportada sobre un sustrato de silicio, considerando polarización s. El cálculo se realiza para las fracciones de cubierta $\Theta = 5\%$, 10%, 15% y 20%. La escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R_s^{máx}$], donde $R_s^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

Al comparar la reflectividad a incidencia normal de la monocapa soportada en el espacio libre [Fig. 2.34(a)] con la monocapa soportada sobre un sustrato de vidrio [Fig. 2.34(b)] y con sustrato de silicio [Fig. 2.34(c)], se encuentra un comportamiento similar a la monocapa de partículas de silicio. Considerando la monocapa sobre el sustrato de vidrio, se observa que para fracciones de cubierta entre 5% y 15% la reflectividad de la metasuperficies es menor a la reflectividad correspondiente a un sustrato de vidrio sin partículas (línea negra), para longitudes de onda mayores a $\lambda = 350$ nm. En el caso de



Fig. 2.34: Reflectividad de una monocapa compuesta de partículas esféricas idénticas de SiC de radio 90 nm (**a**) suspendida en el espacio libre (FSM), (**b**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**c**) soportada sobre un sustrato de silicio, para incidencia normal. Se analizan cuatro fracciones de cubierta: 5% (línea azul), 10%, 15% y 20% (línea amarilla). En las gráficas en (**b**) y (**c**) se agrega la reflectividad del sustrato de vidrio o silicio, respectivamente, sin la monocapa (línea negra).

 $\Theta = 20\%$, alrededor de $\lambda = 490$ nm, aproximadamente, la reflectividad alcanza su máximo (~ 0.042), excediendo la reflectividad del vidrio (0.04). Dentro del resto del rango espectral, con excepción de λ menor a 350 nm, la reflectividad se encuentra por debajo de la del vidrio sin monocapa. También se observa que para $\Theta = 20\%$, entre $\lambda = 650$ nm y $\lambda = 750$ nm, la reflectividad se aproxima a cero. Para el sustrato de silicio [Fig. 2.34(c)] se obtiene que para fracciones de cubierta menores o iguales a 20\%, la reflectividad de la metasuperficie a incidencia normal está por debajo de la reflectividad del sustrato. Al incrementar la fracción de cubierta, la reflectividad disminuye su magnitud, y con $\Theta = 20\%$ la reflectividad es cercana a cero en $\lambda = 375$ nm.

Por último, la transmitancia [Fig. 2.35] de la metasuperficie muestra ligeros cambios al comparar entre la monocapa soportada en el espacio libre, sustrato de vidrio y de silicio. En la monocapa soportada en el espacio libre, para ambas polarizaciones [Fig. 2.35(a, b)], se obtiene una banda principal dentro del intervalo espectral 460–520 nm donde la transmitancia decae a valores cercanos a 0.2. La transmitancia, al considerar la presencia de un sustrato de vidrio, muestra una estructura similar, aunque la banda de transmitancia mínima se corre ligeramente hacia el rojo [Figs. 2.35(c, d)]. En el caso de silicio [Figs. 2.35(e, f)], la banda se extiende para longitudes de onda entre $\lambda = 300$ nm y $\lambda = 540$ nm, aproximadamente. Cabe resaltar, que para el sustrato de silicio no se logra que la transmitancia se acerque a la unidad como en el sustrato de vidrio y la monocapa soportada en el espacio libre.



Fig. 2.35: Comparación de la transmitancia coherente de una monocapa de partículas esféricas de SiC de radio 90 nm (a, b) suspendida en el espacio libre, (c, d) soportada en un sustrato de vidrio o (e, f) de silicio. Para los cálculos se considera la fracción de cubierta $\Theta = 20\%$ y ambos estados de polarización.

2.2.3 Monocapa desordenada soportada de partículas de oro

En cuanto a las propiedades ópticas de la monocapa soportada de partículas de oro de radio 130 nm, en la Fig. 2.36 se muestra la reflectividad para polarización p, considerando $\Theta = 5\%$, 10%, 15% y 20%. Las Figs. 2.36(a–d) corresponden a la reflectividad de la monocapa soportada en el espacio libre. Se observa que la condición de retroesparcimiento mínimo para una partícula esférica de oro de 130 nm se encuentra alrededor de $\lambda = 527$ nm como un mínimo de la reflectividad. En los cálculos de reflectividad para la monocapa soportada en el sustrato de vidrio [Figs. 2.36(e–h)], se encuentra que la metasuperficie presenta regiones amplias donde $R_p \leq 0.01$ y su extensión varía según la fracción de cubierta. Sin



Fig. 2.36: Reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de oro de radio 130 nm (**a**–**d**) suspendida en el espacio libre, (**e**–**h**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**i**–**l**) soportada sobre un sustrato de silicio, considerando polarización *s*. El cálculo se realiza para las fracciones de cubierta $\Theta = 5\%$, 10%, 15% y 20%. La escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R_p^{máx}$], donde $R_p^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

embargo, es notorio la presencia constante de una franja donde la reflectividad se aproxima a cero, que muestra ligeros corrimientos al rojo al incrementar la fracción de cubierta. Para $\Theta = 20 \%$, la franja donde la reflectividad se aproxima a cero se observa dentro del intervalo $\lambda = 500$ nm a $\lambda = 620$ nm, para ángulos de incidencia menores a 20° .

Al considerar que la monocapa está soportada sobre silicio [Figs. 2.36(i–l)], se obtiene que la reflectividad decae a valores menores a 0.01 para fracciones de cubierta mayores a 15 %. En particular, con $\Theta = 20$ %, la zona de reflectividad mínima se extiende desde $\lambda = 620$ nm hasta $\lambda = 1,000$ nm dentro del rango angular 0–50°. Para ángulos de incidencia mayores a 30°, también se observa que R_p es menor a 0.01 para longitudes de onda dentro del rango 400–620 nm. Es interesante notar que la reflectividad no sólo es menor a 0.01, sino que dentro del intervalo 700–1,000 nm se aproxima a cero para ángulos de incidencia de hasta 35°. Cabe mencionar que también se observa la disminución del máximo de reflectividad conforme aumenta la fracción de cubierta.

En la Fig. 2.37 se muestran los resultados para la reflectividad considerando polarización *s* y diferentes fracciones de cubierta: $\Theta = 5\%$, 10%, 15% y 20%. Los resultados de la monocapa soportada en el espacio libre [Figs. 2.37(a–d)] muestran que la reflectividad se suprime alrededor de $\lambda = 527$ nm, al igual que en polarización *p*, pero para un mayor rango en el ángulo de incidencia. Para la monocapa soportada sobre vidrio [Figs. 2.37(e–h)] se observan valores de reflectividad menores a 0.01 e incluso próximos a cero. Es interesante notar que para $\Theta = 15\%$ y 20% la franja de reflectividad mínima se corre hacia el azul al incrementar el ángulo de incidencia. Comparando con el sustrato de silicio, la reflectividad de las



Reflectividad y transmitancia en metasuperficies desordenadas

Fig. 2.37: Reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de oro de radio 130 nm (**a–d**) suspendida en el espacio libre, (**e–h**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**i–l**) soportada sobre un sustrato de silicio, considerando polarización s. El cálculo se realiza para las fracciones de cubierta $\Theta = 5 \%$, 10 %, 15 % y 20 %. La escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R_s^{máx}$], donde $R_s^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

monocapas con fracciones de cubierta menores al 15 % no presentan valores menores al 0.01. Con 20 % se logra suprimir la reflectividad dentro del rango espectral $\lambda = 620$ nm a $\lambda = 1,000$ nm, con ángulos de incidencia menores a 35°.

Al estudiar el comportamiento de los espectros de reflectividad a incidencia normal [Fig. 2.38] se observa que, para fracciones de cubierta menores a 20 %, la reflectividad es menor a la de los dos sustratos sin monocapa dentro de todo el rango espectral estudiado. En el caso del sustrato de vidrio [Fig. 2.38(b)], sólo para longitudes de onda mayores a $\lambda \approx 765$ nm, la reflectividad de la metasuperficie con $\Theta = 20$ % sobrepasa a la del sustrato. Es interesante notar que en la curva de $\Theta = 5$ %, hay un mínimo alrededor de $\lambda = 850$ nm y un máximo en $\lambda = 398$ nm. Al incrementar la fracción de cubierta, el mínimo en $\Theta = 5$ % se convierte en un máximo local, que para $\Theta = 20$ % se convierte en un máximo absoluto (dentro del rango espectral estudiado). El máximo en $\lambda = 398$ nm, en cambio, al aumentar la fracción de cubierta disminuye su magnitud y presenta un ligero corrimiento al rojo. Considerando al sustrato de silicio, al igual que para las monocapas antes estudiadas, la reflectividad disminuye conforme se incrementa la fracción de cubierta. Es interesante que con $\Theta = 20$ % y longitudes de onda mayores a $\lambda = 660$ nm, la reflectividad es cercana a cero. En este caso, a diferencia de otros materiales, el espectro de reflectividad conserva características del sustrato.

La transmitancia para la monocapa de partículas de oro suspendida en el espacio libre [Fig. 2.39(a, b)], soportada sobre un sustrato de vidrio [Fig. 2.39(c, d)] o de silicio [Fig. 2.39(e, f)] no supera el valor 0.7 para ninguno de los estados de polarización. Es notorio que las gráficas de transmitancia



Fig. 2.38: Reflectividad de una monocapa compuesta de partículas esféricas idénticas de oro de radio 130 nm (**a**) suspendida en el espacio libre (FSM), (**b**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**c**) soportada sobre un sustrato de silicio, para incidencia normal. Se analizan cuatro fracciones de cubierta: 5% (línea azul), 10%, 15% y 20% (línea amarilla). En las gráficas en (**b**) y (**c**) se agrega la reflectividad del sustrato de vidrio o silicio, respectivamente, sin la monocapa (línea negra).

correspondientes a la monocapa soportada en el espacio libre y a la metasuperficie con sustrato de vidrio son similares; la diferencia más evidente es el aumento de transmitancia para longitudes de onda mayores a $\lambda = 950$ nm. En ambos casos se observa un mínimo alrededor de $\lambda = 527$ nm, aproximadamente. En contraste, la transmitancia de la metasuperficie con sustrato de silicio muestra al menos dos mínimos cuyo valor es cercano a 0.2. Para longitudes de onda entre 300–970 nm, la transmitancia es menor a 0.5, aproximadamente. Por tanto, las metasuperficies con partículas de oro transmiten menos luz en comparación a las metasuperficies con partículas dieléctricas.



Fig. 2.39: Comparación de la transmitancia coherente de una monocapa de partículas esféricas de oro de radio 130 nm (**a**, **b**) suspendida en el espacio libre, (**c**, **d**) soportada en un sustrato de vidrio o (**e**, **f**) soportada en un sustrato de silicio. Para los cálculos se considera la fracción de cubierta $\Theta = 20 \%$ y ambos estados de polarización.

2.2.4 Monocapa desordenada soportada de partículas de bismuto

Las metasuperficies compuestas de partículas esféricas de bismuto muestran resultados similares a sus análogas con partículas de oro. La reflectividad para polarización *p* calculada tanto para la monocapa soportada en el espacio libre, la monocapa soportada en vidrio o en silicio se muestra en la Fig. 2.40.

En el caso de la monocapa soportada en el espacio libre, Figs. 2.40(a–d), la reflectividad se suprime para la longitud de onda $\lambda = 490$ nm (condición de retroesparcimiento nula para partícula individual), para fracciones de cubierta de hasta del 20 % y con ángulos menores a 30°. También se observa la presencia de regiones de reflectividad menor a 0.01 para longitudes de onda menores a $\lambda = 500$ nm que se extienden sobre todo el rango angular, mientras que para longitudes de onda mayores a $\lambda \approx 700$ nm la región se observa solo con ángulos de incidencia mayores a 40°. Considerando el sustrato de vidrio [Figs. 2.40(e–h)], se obtienen regiones de reflectividad mínima cuyo tamaño decrece al aumentar la fracción de cubierta. Es interesante notar que con $\Theta = 20$ % [ver Fig. 2.40(h)] se obtienen características en la reflectividad similares a la correspondiente en la monocapa soportada en el espacio libre; el máximo dentro de la misma región donde se obtiene para la monocapa soportada en el espacio libre. Por otra parte, con el sustrato de silicio, sólo a partir de $\Theta = 15$ % se obtiene que la reflectividad es menor a 0.01. Con $\Theta = 20$ % se logra una reflectividad menor a 0.01 dentro de una región amplia que se extiende desde $\lambda = 650$ nm a $\lambda = 1,000$ nm, para ángulos de incidencia de hasta 48°.



Fig. 2.40: Reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de bismuto de radio 130 nm (**a**–**d**) suspendida en el espacio libre, (**e**–**h**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**i**–**l**) soportada sobre un sustrato de silicio, considerando polarización *p*. El cálculo se realiza para las fracciones de cubierta $\Theta = 5\%$, 10%, 15% y 20%. La escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R_p^{máx}$], donde $R_p^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

Para la polarización s [Fig. 2.41] se obtienen resultados similares a la polarización p. En la monocapa soportada en el espacio libre [Fig. 2.41(a–d)], alrededor de $\lambda = 490$ nm se suprime la reflectividad para ángulos de incidencia de hasta de 30°. En la reflectividad de la metasuperficie con sustrato de vidrio, Fig. 2.41(e–h), se observa la aparición de zonas de reflectividad mínima, corridas hacia el rojo respecto al resultado de la monocapa soportada en el espacio libre. En particular, con $\Theta = 10\%$, se obtiene una región de reflectividad mínima de mayor tamaño respecto a las fracciones de cubierta 5%, 15% y 20%. Se extiende desde $\lambda = 550$ nm hasta $\lambda = 1,000$ nm para ángulos de incidencia menores a 40°. Se observa



Fig. 2.41: Reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de bismuto de radio 130 nm (**a**–**d**) suspendida en el espacio libre, (**e**–**h**) soportada sobre un sustrato de vidrio y (**i**–**l**) sobre un sustrato de silicio, considerando polarización s. El cálculo se realiza para las fracciones de cubierta $\Theta = 5\%$, 10%, 15% y 20%. La escala de grises indica valores entre 0 y 0.01, mientras que para los valores entre (0.01, $R_s^{máx}$], donde $R_s^{máx}$ es el máximo de reflectividad obtenido, se utiliza una escala de colores de azul a rojo.

que para ángulos de incidencia entre 40° y 56° la reflectividad también es próxima a 0.01 para longitudes de onda entre 390–520 nm. Es interesante notar que, para $\Theta = 15\%$ y $\Theta = 20\%$, las regiones donde $R_p < 0.01$ disminuyen el rango espectral al cual aparecen respecto al resultado con $\Theta = 10\%$. Sin embargo, se extienden dentro de todo el rango angular y se corren al azul conforme aumenta el ángulo de incidencia. En el sustrato de silicio, Fig. 2.41(i–l), se observa que sólo para $\Theta = 20\%$ se obtiene una reflectividad menor al 0.01, dentro de una región que se extiende desde $\lambda = 650$ nm hasta $\lambda = 1,000$ nm, para ángulos de incidencia menores a 40°. El aumento de la fracción de cubierta, dado que se mantiene el radio fijo, implica un aumento en la cantidad de partículas sobre el sustrato, por lo que la disminución de la reflectividad observada en las Figs. 2.41(i–l) está relacionada con la cantidad de partículas en la monocapa.

La reflectividad a incidencia normal, Figs. 2.42, muestra una tendencia similar a la observada en los materiales anteriormente estudiados. Tanto para el sustrato de vidrio como el de silicio, se obtiene que la presencia de las partículas esféricas de bismuto causa una disminución respecto a la reflectividad del sustrato. Particularmente, con el sustrato de vidrio [Figs. 2.42(b)], a partir de $\Theta = 10$ %, en el espectro de reflectividad se aprecia un mínimo entre longitudes de onda $\lambda = 550$ nm y $\lambda = 690$ nm.

De forma análoga al caso de partículas de oro [Fig. 2.39], se obtiene que la transmitancia de la metasuperficie con partículas de bismuto [Fig. 2.43] es menor a 0.6 tanto en la monocapa soportada en el espacio libre, como en la monocapa soportada sobre los sustratos de vidrio y silicio. En la monocapa soportada en el espacio libre se localiza un mínimo de reflectividad alrededor de $\lambda = 460$ nm para ambos



Fig. 2.42: Reflectividad de una monocapa compuesta de partículas esféricas idénticas de bismuto de radio 130 nm suspendida en (a) el espacio libre (FSM), (b) soportada sobre un sustrato de vidrio y (c) soportada sobre un sustrato de silicio, para incidencia normal. Se analizan cuatro fracciones de cubierta: 5% (línea azul), 10%, 15% y 20% (línea amarilla). En las gráficas en (b) y (c) se agrega la reflectividad del sustrato de vidrio o silicio, respectivamente, sin la monocapa (línea negra).

estados de polarización [ver [Figs. 2.43(a) y (b)]]. Al introducir el sustrato de vidrio [Fig. 2.43(b)] se obtiene una estructura similar a la del monocapa soportada en el espacio libre, con un ligero corrimiento del mínimo hacia el rojo. Para el sustrato de silicio [Fig. 2.43(c)] se obtiene una franja donde la reflectividad es menor a 0.2, aproximadamente y para longitudes de onda de hasta $\lambda = 950$ nm la reflectividad es menor a 0.4.



Fig. 2.43: Comparación de la transmitancia coherente de una monocapa de partículas esféricas de bismuto de radio 130 nm (a, b) suspendida en el espacio libre, (c, d) soportada en un sustrato de vidrio o (e, f) soportada en un sustrato de silicio. Para los cálculos se considera la fracción de cubierta $\Theta = 20 \%$ y ambos estados de polarización.

Capítulo 3

APLICACIONES DE METASUPERFICIES DESORDENADAS

1 LOCALIZACIÓN DE ÁNGULOS DE SEUDO-BREWSTER

A partir de los resultados obtenidos para la reflectividad de las metasuperficies analizadas, compuestas tanto de partículas dieléctricas (silicio y carburo de silicio) como con respuesta metálica (oro y bismuto), se encontraron combinaciones de parámetros (fracción de cubierta, longitud de onda y ángulo de incidencia) en los que se observan ángulos seudo-Brewster. Es decir, ángulos para los cuales la reflectividad, ya sea en polarización *s* o *p*, presenta un mínimo (cercano a cero). El efecto Brewster generalizado se ha observado en monocapas ordenadas de partículas esféricas de silicio, tanto teórica como experimentalmente [38]. También se ha estudiado la respuesta óptica de monocapas desordenadas de partículas esféricas dieléctricas, en las cuales no se encontraron ángulos de seudo-Brewster en el espectro de reflectividad a la longitud de onda incidente para la cual la partícula individual minimiza el retroesparcimiento [39]. En la subsubsección 3.1 del primer capítulo se explicó que el efecto Brewster generalizado proviene de la interferencia de la radiación debida a multipolos inducidos en las partículas que compone a una monocapa. Por lo tanto, para buscar ángulos seudo-Brewster en las monocapas estudiadas primero se localizarán en las monocapas suspendidas en el espacio libre, para después verificar si al considerar la presencia del sustrato, los ángulos de seudo-Brewster siguen presentes.

1.1 Metasuperficie de partículas de silicio

En la Fig. 3.1 se compara la reflectividad de una monocapa de partículas esféricas de silicio, de radio 60 nm, suspendida en el espacio libre [Fig. 3.1(a, b)] y soportada en un sustrato de vidrio Fig. 3.1(c, d)], considerando una fracción de cubierta optimizada del 7.5 %, y seleccionando longitudes de onda para las cuales se observa un ángulo de seudo-Brewster. En el caso de la monocapa sin sustrato, se estudia el intervalo de 440–460 nm para polarización p y el de 520–540 nm para polarización s, mientras que para la metasuperficie soportada en un sustrato se considera el intervalo de 405–435 nm para polarización p y el de 505–525 nm para polarización s. En la monocapa suspendida en el espacio libre, con polarización p [Fig. 3.1(a)], se obtuvo que dentro del rango espectral 440–460 nm se obtienen mínimos de la reflectividad menores a 0.008, dentro del rango angular 45–52°. Se observa que conforme aumenta la longitud de onda, también aumenta el valor del ángulo para el cual la reflectividad es mínima. Para polarización s, se obtuvieron ángulos de seudo-Brewster para longitudes de onda entre 520–540 nm alrededor de ángulos respecto al resultado con polarización p. Estos mínimos igualmente se aproximan a cero y conforme se consideran longitudes de onda mayores, el valor del ángulo donde aparece el mínimo decrece. Por

tanto, el efecto Brewster generalizado está presente en una monocapa desordenada de partículas de silicio suspendida en el vacío.



Fig. 3.1: Reflectividad de una monocapa compuesta de partículas de silicio de radio 60 nm (**a**, **b**) suspendida en el espacio libre y (**c**, **d**) soportada sobre un sustrato de vidrio. Se consideran ambos estados de polarización p en (**a**, **c**) y s en (**b**, **d**). La fracción de cubierta utilizada en ambos casos es 7.5 %. La línea negra en (**c**, **d**) corresponde a la reflectividad del sustrato de vidrio. La transmitancia de la metasuperficie de partículas de silicio de radio 60 nm soportadas sobre un sustrato de vidrio se muestra para polarización (**e**) p y (**f**) s, en donde la línea negra corresponde a la transmitancia del sustrato de vidrio. Las líneas de colores corresponden a longitudes de onda entre (**a**) $\lambda = 440$ nm y $\lambda = 460$ nm, (**b**) $\lambda = 520$ nm y $\lambda = 540$ nm, (**c**, **e**) $\lambda = 405$ nm y $\lambda = 435$ nm, y (**d**, **f**) $\lambda = 505$ nm y $\lambda = 525$ nm, siendo el rojo la longitud de onda más larga y el violeta la menor.

Por otro lado, al considerar que la monocapa está soportada en un sustrato de vidrio, con polarización p [Fig. 3.1(c)], aparecen ángulos de seudo-Brewster dentro del intervalo 405–435 nm, mientras que para la polarización s [Fig. 3.1(d)], aparecen para longitudes de onda en el rango 505–525 nm. En ambos estados de polarización, los mínimos de reflectividad alcanzan valores menores a 0.001. En particular, para

polarización p y para $\lambda = 411$ nm se minimiza la reflectividad a un valor cercano a 1×10^{-6} , mientras que para polarización s y $\lambda = 519$ nm, la reflectividad es próxima 7×10^{-6} . Al comparar con la reflectividad del sustrato de vidrio sin partículas [curva negra en las Figs. 3.1(c, d)], se observa que el efecto de seudo-Brewster se presenta a ángulos de incidencia menores que en el vidrio (sin monocapa) ($\theta_i \approx 56.1^\circ$). En las Figs. 3.1(c, d) se indican zonas en gris que señalan los intervalos angulares donde aparecen los ángulos de seudo-Brewster. Es interesante notar que para polarización p los ángulos de seudo-Brewster aparecen para valores del ángulo de incidencia entre 44° y 49°, mientras que para polarización s se encontraron entre 30° y 40°. En las Figs. 3.1(e, f) se muestra la transmitancia de la monocapa soportada y se observa que, en la región donde se observan los ángulos de seudo-Brewster, la transmitancia es menor a la del sustrato (línea negra), por lo que se concluye que la metasuperficie extingue parcialmente la luz incidente.

1.2 Metasuperficie de partículas de carburo de silicio

Al considerar partículas de SiC en la monocapa, también se observaron ángulos de seudo-Brewster. En la Fig. 3.2 se muestran las longitudes de onda para las que aparecen ángulos de seudo-Brewster en una monocapa de partículas de SiC de radio 90 nm y fracción de cubierta optimizada de 15 %. Considerando la monocapa suspendida en el espacio libre, Figs. 3.2(a, b), se obtuvieron ángulos de seudo-Brewster dentro de los intervalos espectrales 580–1,000 nm para polarización p, y 480–540 nm para polarización s, cuyos mínimos alcanzan valores menores a 0.001. En el caso de polarización p, los mínimos de reflectividad se localizan alrededor de ángulos de incidencia entre 25° y 43°, mientras que para polarización s se encuentran entre 17° y 28°, aproximadamente.

En las Figs. 3.2(c, d) se muestran los ángulos de seudo-Brewster obtenidos para la monocapa soportada sobre vidrio. Para este caso, los mínimos alcanzan valores menores a 0.005 y también se localizan a ángulos de incidencia menores al ángulo de Brewster del vidrio [curva negra Fig. 3.2(c)]. En particular, en polarización p y $\lambda = 300$ nm, la reflectividad alcanza valores de 3×10^{-6} , mientras que para la polarización s y $\lambda = 560$ nm la reflectividad es 1×10^{-7} . Es interesante notar que el rango angular en el que aparecen ángulos de seudo-Brewster localizados para la metasuperficie de partículas de silicio. Los ángulos de incidencia dentro del intervalo angular $24-40^{\circ}$ para polarización p, y $18-37^{\circ}$ para polarización s. Al analizar la transmitancia [Figs. 3.2(e, f)] se comprueba que, de forma análoga a las partículas de silicio, a pesar de tener reflectividades bajas, la transmitancia es menor a la del sustrato de vidrio [curva negra en las Figs. 3.2(e, f)], por lo que la metasuperficie extingue parte de la luz incidente.

1.3 Metasuperficie de partículas de oro

En monocapas compuestas por partículas metálicas como el oro también se localizaron ángulos de seudo-Brewster. En la Fig. 3.3 se muestran curvas de reflectividad donde se observan ángulos de seudo-Brewster en una monocapa de partículas de oro, de radio 130 nm y con fracción de cubierta optimizada 18 %. Se analizaron las longitudes de onda entre 450–575 nm y 300–500 nm, para la polarización *p* y *s*, respectivamente. En las Figs. 3.3(a, b) se presentan las curvas de reflectividad para la monocapa suspendida en el espacio libre; en ambas polarizaciones se obtienen mínimos que no están bien definidos como los mínimos que se encuentran en las monocapas de partículas de silicio o SiC [Figs. 3.1(a, b) y Figs. 3.2(a, b)]. Es interesante notar que, en el caso de polarización *p*, se observa un mínimo alrededor de $\theta_i \approx 17^\circ$ con $\lambda = 450$ nm. Sin embargo, también se observa la formación de mínimos de reflectividad para ángulos de incidencia mayores a 55° para longitudes de onda entre $\lambda = 450$ nm y $\lambda = 575$ nm. En el caso de polarización *s* [Fig. 3.3(b)] se observa la formación de mínimos para longitudes de onda entre $\lambda = 300$ nm y $\lambda = 450$ nm alrededor de ángulos de incidencia entre 26° y 52°.


Fig. 3.2: Reflectividad de una monocapa compuesta de partículas de SiC de radio 90 nm (**a**, **b**) suspendida en el espacio libre y (**c**, **d**) soportada sobre un sustrato de vidrio. Se consideran ambos estados de polarización p en (**a**, **c**) y s en (**b**, **d**). La fracción de cubierta utilizada en ambos casos es 15 %. La línea negra en (**c**, **d**) corresponde a la reflectividad del sustrato de vidrio. La transmitancia de la metasuperficie de partículas de SiC de radio 90 nm soportadas sobre un sustrato de vidrio se muestra para polarización (**e**) p y (**f**) s, en donde la línea negra corresponde a la transmitancia del sustrato de vidrio. Las líneas de colores corresponden a longitudes de onda entre (**a**) $\lambda = 580$ nm y $\lambda = 1000$ nm, (**b**) $\lambda = 480$ nm y $\lambda = 540$ nm, (**c**, **e**) $\lambda = 300$ nm y $\lambda = 360$ nm, y (**d**, **f**) $\lambda = 400$ nm y $\lambda = 560$ nm, siendo el rojo la longitud de onda más larga y el violeta la menor.

Al considerar el efecto del sustrato de vidrio [Figs. 3.3(c, d)], considerando las mismas longitudes de onda que para el caso de la monocapa suspendida en aire, aparecen mínimos mejor definidos, principalmente para la polarización s. En particular, para polarización p y $\lambda = 550$ nm se obtiene que la reflectividad es 0.0001, mientras que para polarización s y $\lambda = 325$ nm la reflectividad es cercana a 0.0001. Los ángulos de seudo-Brewster aparecen dentro del rango angular 13–34° para polarización p y 23-59° para polarización s. Análogamente a las metasuperficies compuestas por partículas dieléctricas,



en las Figs. 3.3(e, f) se observa que alrededor de los ángulos de seudo-Brewster la transmitancia de la metasuperficie de partículas de oro es menor a la transmitancia del sustrato de vidrio (línea negra), por lo que hay efectos de extinción de la luz por parte de la monocapa.

Fig. 3.3: Reflectividad de una monocapa compuesta de partículas de oro de radio 130 nm (**a**, **b**) suspendida en el espacio libre y (**c**, **d**) soportada sobre un sustrato de vidrio. Se consideran ambos estados de polarización p en (**a**, **c**) y s en (**b**, **d**). La fracción de cubierta utilizada en ambos casos es 18 %. La línea negra en (**c**, **d**) corresponde a la reflectividad del sustrato de vidrio. La transmitancia de la metasuperficie de partículas de oro de radio 130 nm soportadas sobre un sustrato de vidrio se muestra para polarización (**e**) p y (**f**) s, en donde la línea negra corresponde a la transmitancia del sustrato de vidrio. Las líneas de colores corresponden a longitudes de onda entre (**a**, **c**, **e**) $\lambda = 450$ nm y $\lambda = 575$ nm, (**b**, **d**, **f**) $\lambda = 300$ nm y $\lambda = 550$ nm, siendo el rojo la longitud de onda más larga y el violeta la menor.

1.4 Metasuperficie de partículas de bismuto

Por último, para la monocapa de partículas de bismuto de radio 130 nm y $\Theta = 20\%$ también se observa el efecto Brewster generalizado. En las Figs. 3.4(a, b) se muestra la reflectividad de la monocapa suspendida en el espacio libre, para polarización p y s, respectivamente. En este caso, se estudiaron los intervalos 300–400 nm para polarización p y 350–500 nm para polarización s. En la Fig. 3.4(a) se observa que los mínimos se extienden desde $\theta_i \approx 22.5^\circ$ hasta $\theta_i \approx 42^\circ$, alcanzando valores menores a 0.002.

En polarización s [Fig. 3.4(b)] se localizaron mínimos menos pronunciados respecto al resultado con polarización p, y se observa que para longitudes de onda mayores a $\lambda = 485$ nm los mínimos pierden definición. Al considerar el sustrato de vidrio en polarización p [Fig. 3.4(c)], se observan nuevamente los ángulos de seudo-Brewster. En comparación a la monocapa suspendida en aire [Fig. 3.4(a)], los mínimos de la metasuperficie corresponden a reflectividades mayores de entre 0.002 y 0.005. En polarización s [Fig. 3.4(d)], los mínimos que aparecen son más pronunciados en comparación al resultado con la monocapa suspendida en aire. En este caso, los mínimos aparecen dentro del intervalo angular 39°-56° y alcanzan valores menores a 0.002. En particular, para polarización p y $\lambda = 300$ nm la reflectividad es 0.002, mientras que para polarización s y $\lambda = 350$ nm la reflectividad es 0.0004. Nuevamente, la transmitancia [Figs. 3.4(e, f)] es menor a la del sustrato de vidrio (línea negra), por lo que la metasuperficie extingue parte de la luz incidente.



Fig. 3.4: Reflectividad de una monocapa compuesta de partículas de bismuto de radio 130 nm (**a**, **b**) suspendida en el espacio libre y (**c**, **d**) soportada sobre un sustrato de vidrio. Se consideran ambos estados de polarización p en (**a**, **c**) y s en (**b**, **d**). La fracción de cubierta utilizada en ambos casos es 20 %. La línea negra en (**c**, **d**) corresponde a la reflectividad del sustrato de vidrio se muestra para polarización (**e**) p y (**f**) s, en donde la línea negra corresponde a la transmitancia del sustrato de vidrio. Las líneas de colores corresponden a longitudes de onda entre (**a**, **c**, **e**) $\lambda = 300$ nm y $\lambda = 400$ nm, (**b**, **d**, **f**) $\lambda = 350$ nm y $\lambda = 500$ nm, siendo el rojo la longitud de onda más larga y el violeta la menor.

En resumen, las monocapas suspendidas en el espacio libre presentan ángulos de seudo-Brewster, que se conservan al introducir el efecto del sustrato. En algunos casos, el rango espectral donde aparecen los ángulos de seudo-Brewster se corren al azul debido al sustrato de vidrio. Igualmente, la presencia del sustrato puede contribuir a que los mínimos de la reflectividad se aproximen más al cero respecto al resultado de la monocapa suspendida en aire. Es interesante que en las monocapas de partículas metálicas se pueden localizar ángulos de seudo-Brewster dentro del mismo rango espectral tanto para la FSM como para la monocapa soportada sobre el sustrato dieléctrico. Cabe mencionar que si bien durante este análisis se utilizaron valores de fracción de cubierta fijos (optimizados para minimizar la reflectividad), se pueden localizar ángulos de seudo-Brewster para otros valores de Θ . Dependiendo del valor de la fracción de cubierta, el intervalo de longitudes de onda para los que aparezcan los ángulos de seudo-Brewster cambiará y también puede suceder que los mínimos no se aproximen tanto al cero de reflectividad, como en los resultados presentados en esta sección.

Otro aspecto importante es que, al considerar un sustrato con índice de refracción mayor al del vidrio, por ejemplo, silicio, el efecto generalizado de Brewster continua presente. Con el propósito de ejemplificarlo, en la Fig. 3.5(a, b) se muestran los ángulos de seudo-Brewster localizados para una monocapa de partículas de silicio (a = 60 nm, $\Theta = 14\%$) para ambas polarizaciones. Se obtiene que



Fig. 3.5: Ángulos de seudo-Brewster identificados para una monocapa de partículas de silicio, de radio 60 nm, soportada sobre un sustrato de silicio, con una fracción de cubierta de 14 %. Se considera que la matriz está compuesta de (**a**, **b**) aire ($n_m = 1$), (**c**, **d**) agua ($n_m = 1.33$) y (**f**, **g**) vidrio ($n_m = 1.5$). En (**a**, **c**, **e**) se muestran resultados para la polarización *p*, mientras que en (**b**, **d**, **f**) para polarización *s*. Los espectros de reflectividad del sustrato de silicio sin monocapa para polarización (**g**) *p* y (**h**) *s* se muestran para las longitudes de onda incidentes $\lambda = 400$ nm (línea negra punteada) y $\lambda = 540$ nm (línea negra continua).

los ángulos de seudo-Brewster se localizan dentro de los intervalos 490-500 nm (polarización *p*) y 500-540 nm (polarización *s*). Resulta interesante notar en la Fig. 3.5(b) que los ángulos de seudo-Brewster pueden aparecer a valores del ángulo de incidencia desde 20° hasta 59°. En las Figs. 3.5(g, h) se presentan las curvas de reflectividad para el puro sustrato de silicio (sin monocapa). El índice de refracción silicio no se considera constante, por ello, se grafica la reflectividad para $\lambda = 400$ nm (línea punteada) y $\lambda = 540$ nm (línea continua). El ángulo de Brewster aparece alrededor de ~ 79.8°, para $\lambda = 400$ nm, y de ~ 76.4°, para $\lambda = 540$ nm. Por tanto, para longitudes de onda entre $\lambda = 400$ nm y $\lambda = 540$ nm, el ángulo de Brewster aparece en un valor intermedio entre 76.4° y 79.8°. Es interesante notar que los ángulos de seudo-Brewster obtenidos con la metasuperficie de partículas de silicio soportada sobre silicio se localizan alrededor de valores menores al ángulo de Brewster del sustrato de silicio sin monocapa.

Para complementar el análisis, se realizaron cálculos de la reflectividad para la monocapa de partículas de silicio (a = 60 nm, $\Theta = 14$ %) soportada en silicio, considerando tanto una matriz de agua [Figs 3.5(c, d)] como de vidrio [Figs 3.5(e, f)]. En ambos casos se encontró la presencia de ángulos seudo-Brewster, apareciendo a longitudes de onda menores, para polarización p, y mayores, para polarización s, comparado al resultado con matriz de aire. Para el caso con matriz de agua, los mínimos de reflectividad aparecen en intervalos angulares menores. En el caso de polarización p aparecen desde $\theta_i = 53.9^\circ$ hasta $\theta_i = 59^\circ$, mientras que para polarización s, desde $\theta_i = 29^\circ$ hasta $\theta_i = 38^\circ$. En el caso de la matriz de vidrio [Figs. 3.5(e, f)] los ángulos de seudo-Brewster aparecen dentro de los rangos angulares 53–60° para polarización p, y 36–50° para polarización s. Cabe resaltar que para las tres matrices consideradas (aire, agua y vidrio), los mínimos corresponden a reflectividades menores a 0.001. En particular, el valor de reflectividad más bajo se obtuvo con la matriz de aire, polarización s y $\lambda = 508$ nm, donde el mínimo de reflectividad es cercano a 6×10^{-6} .

2 METASUPERFICIES ALEATORIAS ANTIREFLEJANTES

Las metasuperficies propuestas en el capítulo anterior son capaces de reducir la reflectividad de manera eficiente. En particular, las metasuperficies compuestas por partículas con respuesta metálica muestran propiedades antireflejantes, ya que la reflectividad disminuye a valores iguales o menores al 1 % en intervalos angulares y espectrales amplios. Por tal motivo, en esta sección se realiza un análisis detallado de la disminución de la reflectividad en metasuperficies aleatorias compuestas de partículas con respuesta metálica, en particular oro o bismuto. Los mapas de reflectividad que se presentan a continuación se comparan directamente con la reflectividad del puro sustrato sin partículas.

En las Figs. 3.6(a, b) se muestran mapas de reflectividad de un sustrato de vidrio (sin monocapa), mientras que en las Figs. 3.6(c, d) se muestra la reflectividad para una monocapa de partículas de oro soportadas en vidrio y en las Figs. 3.6(e, f) para una monocapa de partículas de bismuto sobre vidrio. Las gráficas de la columna izquierda corresponden a polarización p y las de la derecha a polarización s. Cabe destacar que los valores máximos de reflectividad que alcanza el sustrato de vidrio, dentro de los rangos 400–1,000 nm y 0–60°, es 0.04 para polarización p y 0.175 para polarización s. Al considerar la metasuperficie con partículas de oro (a = 130 nm, $\Theta = 9\%$), la reflectividad disminuye de forma general para ambos estados de polarización. En particular, el máximo de reflectividad alcanzado con polarización p es ~ 0.032 , mientras que para polarización s es cercano a 0.1. También se observa que aparecen regiones donde la reflectividad es mínima (R < 0.01), denotadas con escala de grises. En la Fig. 3.6(c), para polarización p, la reflectividad es menor a 0.01 dentro de una región extensa de valores de la longitud de onda y del ángulo de incidencia. Sólo para longitudes de onda menores a $\lambda \approx 560$ nm y $\theta_i < 28^\circ$, la reflectividad es mayor a 0.01, al igual que para una pequeña región de $\theta_i > 56^\circ$ y longitudes de onda desde $\lambda = 530$ nm. Para polarización s [Fig. 3.6(d)] la reflectividad es menor a 0.01 para longitudes de onda desde $\lambda = 550$ nm hasta $\lambda = 1,000$ nm, y para ángulos de incidencia menores a 35°. Para ambas polarizaciones se encuentran combinaciones de ángulos de incidencia y longitudes de onda para las que la reflectividad se aproxima a cero (regiones negras en los espectros). Estas regiones de



Fig. 3.6: Reflectividad en función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia para (**a**, **b**) un sustrato plano de vidrio, (**c**, **d**) para una monocapa de partículas de oro sobre un sustrato de vidrio y (**e**, **f**) para una monocapa de partículas de bismuto sobre un sustrato de vidrio. Las partículas son de radio a = 130 nm tanto para el oro como para el bismuto. Las gráficas (**a**), (**c**) y (**e**) corresponden a polarización *p*, mientras que (**b**), (**d**) y (**f**) a polarización *s*. Para la monocapa de partículas de oro se consideró una fracción de cubierta de 9 % y para la de bismuto de 10 %.

muy baja reflectancia se encuentran corridas hacia el rojo en comparación a la monocapa suspendida en el espacio libre [Figs. 2.24 y 2.26].

La metasuperficie de partículas de bismuto (a = 130 nm, $\Theta = 10\%$) soportada en vidrio [Fig. 3.6(e, f)] también muestra una disminución de la reflectividad para ambos estados de polarización. En el caso de polarización p [Fig. 3.6(e)] la reflectividad es mayor a 0.01 sólo para longitudes de onda menores a $\lambda = 540 \text{ nm}$ y ángulos de incidencia menores 28°, y una franja angosta con $\theta_i > 50^\circ$. En la Fig. 3.6(f), polarización s, se observa que la reflectividad es menor a ~ 0.0176 . En este caso, la reflectividad alcanza valores menores o iguales a 0.01 para longitudes de onda dentro del intervalo 540–1,000 nm, con ángulos

de incidencia de hasta 40°. Igualmente, se observa que para longitudes de onda menores a $\lambda = 500$ nm, la reflectividad es cercana a 0.01 para ángulos entre 40° y 55°.

Al modificar el sustrato sobre el que se encuentran depositadas las partículas esféricas, ya sea de oro o de bismuto, por un sustrato de mayor índice de refracción, como el silicio, se observa un comportamiento similar al sustrato de vidrio. En las Figs. 3.7(a, b) se muestran los mapas de reflectividad correspondiente al sustrato de silicio plano. Los valores máximos de reflectividad obtenidos son cercanos a 0.49 y 0.7, para polarización p y s, respectivamente. En este caso, se consideran monocapas de oro y bismuto compuestas por partículas de radio 130 nm y $\Theta = 20\%$ soportadas en silicio. En las Figs. 3.7(c, d) se



Fig. 3.7: Reflectividad en función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia para (**a**, **b**) un sustrato plano de silicio, (**c**, **d**) para una monocapa de partículas de oro sobre un sustrato de silicio y (**e**, **f**) para una monocapa de partículas de bismuto sobre un sustrato de silicio. Las partículas tienen radio a = 130 nm tanto para el oro como para el bismuto. Las gráficas (**a**), (**c**) y (**e**) corresponden a polarización *p*, mientras que (**b**), (**d**) y (**f**) a polarización *s*. Para ambas monocapas se consideró una fracción de cubierta del 20 %.

muestra la reflectividad de una metasuperficie de partículas de oro. Se observa que para ambos estados de polarización, la reflectividad disminuye para todas las longitudes de onda y ángulos de incidencia, respecto al sustrato plano de silicio. En particular, la reflectividad es menor a 0.01 para longitudes de onda desde $\lambda = 620$ nm a $\lambda = 1,000$ nm, para ángulos de incidencia menores a 55° para polarización p y 35° para polarización s. También se observa una región, desde $\lambda = 700$ nm a $\lambda = 980$ nm, para la cual la reflectividad se aproxima a cero. Las Figs. 3.7(e, f) muestran los resultados para la monocapa de partículas de bismuto soportada en silicio. La zona de reflectividad mínima para la metasuperficie de partículas de bismuto se extiende desde $\lambda = 640$ nm hasta $\lambda = 1,000$ nm, para ángulos de incidencia de hasta 50°. Cabe destacar que fuera de las regiones donde la reflectividad es mayor a 0.01, no sobrepasa a 0.2, aproximadamente.

Al comparar las reflectividades máximas que alcanzan las metasuperficies de partículas de oro o de bismuto con la reflectividad de los sustratos planos, se observa para el sustrato de vidrio una disminución cercana al 15 % (partículas de oro) y 12.5 % (partículas de bismuto) para polarización p, mientras que para polarización s es de 52 %, en ambas monocapas. Para el sustrato de silicio la disminución es mayor, cercana a 59 % para polarización p y 71 % para polarización s, para partículas de oro o bismuto. En general, se obtuvo una disminución de la reflectividad promedio del ~ 80 % para el sustrato de silicio y del ~ 70 % para el vidrio, en las regiones donde la reflectividad es mayor a 0.01. Los resultados obtenidos para la reflectividad de las metasuperficies propuestas se compararon con otros trabajos reportados

OTROS TRABAJOS							
	Reflectividad	Longitud de onda de operación	Tolerancia angular				
Nanoesferas de Au / Sustrato de Si [98]	0.5 % 5 %	560 nm 400–700 nm	40° Sin polarización				
Nanoesferas de Ag / Sustrato de Si [37]	3 %	400 nm	Incidencia normal				
Nanoesferas de Si / Sustrato de Si [37]	0.4 %	480 nm	Incidencia normal				
Nanocilindros de Si / Sustrato de Si [99]	1.3 %	450–900 nm	Incidencia normal				

DISEÑOS PROPUESTOS EN ESTA TESIS							
	Reflectividad	Longitud de onda de operación	Tolerancia angular				
Nanoesferas de Au o Bi / Vidrio	$\leq 1 \%$	550–1000 nm	35° (polarización <i>s</i>) 55° (polarización <i>p</i>)				
	< 1.01	(40, 1000	35° (polarización s)				

Nanoesferas de Au / Sustrato Si

Nanoesferas de Bi / Sustrato Si

Tabla 3.1: Comparación entre las metasuperficies propuestas en este trabajo y otros estudios reportados en la literatura para capas antireflejantes basados en resonadores de menor tamaño que la longitud de onda incidente.

< 1%

< 1%

640-1000 nm

640-1000 nm

 45° (polarización *p*) 35° (polarización *s*)

 40° (polarización p)

en la literatura, en los que se estudian propiedades antireflejantes de metasuperficies. En la tabla 3.1 se muestran resultados para metasuperficies considerando tanto nanoesferas de oro, plata o silicio, como de nanocilindros de silicio sobre sustratos de silicio. Usando nanopartículas de oro soportadas en silicio [98] se obtiene una disminución de la reflectividad a valores menores a 5 % dentro del rango 400–700 nm. En particular, alrededor de $\lambda = 560$ nm, la reflectividad se aproxima a 0.5 %, con una tolerancia angular de 40°. En las referencias [37, 99] se reportó el uso de nanoesferas y nanocilindros de silicio, respectivamente, soportados en silicio. Las nanoesferas logran reflectividades bajas de hasta 0.4 % para $\lambda = 480$ nm a incidencia normal, mientras que los nanocilindros operan dentro del rango espectral 450–900 nm, mostrando reflectividades menores a 1.3 %, también a incidencia normal.

Las metasuperficies propuestas en este trabajo, con un sustrato de vidrio, logran reflectividades menores al 1%, teniendo una tolerancia angular de 35° , para polarización *s*, y de 55° , para polarización *p*, dentro de un amplio rango espectral de 550-1,000 nm. Para un sustrato de silicio, las metasuperficies logran reflectividades menores a 1% en el rango 640-1,000 nm, con tolerancia angular de 40° para polarización *s*. Si bien sólo se mostraron cálculos realizados con partículas de oro o bismuto, el mismo efecto puede observarse en monocapas compuestas por partículas esféricas de otros metales, puesto que sólo se necesita excitar la respuesta del dipolo y cuadrupolo eléctricos. Cabe mencionar que los resultados reportados en esta sección fueron publicados en el artículo [36].

Conclusiones

En este trabajo de tesis de licenciatura se caracterizó la respuesta óptica de metasuperficies compuestas por partículas esféricas idénticas, distribuidas al azar, alcanzando fracciones de cubierta de hasta el 20 %. El análisis se realizó tanto para partículas dieléctricas (silicio y carburo de silicio) como con respuesta metálica (oro y bismuto). A partir del modelo de esparcimiento coherente, se estudió teóricamente la reflectividad y transmitancia coherentes de la monocapa de partículas, para una ventana de longitudes de onda de 300-1,000 nm y una ventana angular de $0-60^{\circ}$, para ambas polarizaciones. Primero, se analizó la respuesta óptica considerando que la monocapa está suspendida en el espacio libre y posteriormente se consideró que la monocapa está sobre un sustrato dieléctrico. A partir de este análisis se corroboró que la respuesta óptica de la partícula individual se preserva en la respuesta óptica de la monocapa de partículas.

El análisis de la respuesta óptica de una partícula esférica individual se realizó a través de la teoría de Mie, obteniendo las frecuencias de resonancia multipolares para cada material estudiado. Se mostró que en los materiales dieléctricos, como el silicio y carburo de silicio, domina la respuesta del dipolo magnético inducido, seguida por el dipolo eléctrico, mientras que en materiales con respuesta metálica, oro y bismuto, las resonancias dominantes corresponden al dipolo y cuadrupolo eléctricos inducidos en las partículas. También se estudió el corrimiento de las frecuencias de resonancia de los diferentes modos multipolares al considerar diferentes materiales (aire, agua y vidrio) en los que están inmersa la partícula, es decir, la matriz. Se observó que las resonancias sufren corrimientos hacia el rojo debido al aumento en el índice de refracción de la matriz. Al cambiar de una matriz de aire a vidrio, se observó para el dipolo eléctricos inducidos dieléctricas el corrimiento fue menor a 20 nm. También se observó que al incrementar el índice de refracción de la matriz, aparecen resonancias de orden mayor al dipolar en la respuesta óptica de la partícula dentro del rango visible. Por ejemplo, el octupolo eléctrico, que no se observa al considerar la matriz de aire, aparece claramente para una matriz de vidrio.

A partir del análisis de las partículas individuales se determinaron los tamaños de partícula para los que la respuesta óptica está dominada por los dipolos eléctrico y magnético (partículas dieléctricas), o bien el dipolo y cuadrupolo eléctricos (partículas con respuesta metálica). Se determinaron las longitudes de onda del haz incidente para las cuales se obtiene una minimización del retroesparcimiento o del esparcimiento frontal de la partícula, para cada material, conocidos como efectos tipo Kerker. Para el caso de partículas dieléctricas, se obtuvo que para una partícula de silicio con radio de 60 nm se puede tanto minimizar el retroesparcimiento como el esparcimiento frontal; mientras que para una partícula de carburo de silicio, de radio 90 nm, se encontró sólo la longitud de onda a la que se minimiza el retroesparcimiento. Estos efectos tipo Kerker se deben a la interferencia de la radiación de los dipolos eléctrico y magnético inducidos en la partícula. Para el caso de materiales con respuesta metálica, partículas de radio 130 nm tanto para el oro como para el bismuto, se encontró la longitud de onda para la cual se minimiza el retroesparcimiento, consecuencia de la interferencia de la radiación proveniente del dipolo y cuadrupolo eléctricos.

Para el estudio de la respuesta óptica de las monocapas desordenadas, para cada material considerado, se usaron los mismos radios en los que se observaron efectos tipo Kerker en partículas individuales. En

CAPÍTULO 3 • CONCLUSIONES

los resultados para la reflectividad de las monocapas de partículas esféricas suspendidas en el espacio libre, se observó que existen combinaciones de parámetros de longitud de onda y ángulo de incidencia para los que la reflectividad es menor al 1 %, tanto para las monocapas de partículas dieléctricas como las de respuesta metálica, en ambas polarizaciones. También se observó que existen regiones donde la reflectividad se aproxima a cero, localizadas alrededor de las longitudes de onda para las que se encontró el mínimo de retroesparcimiento de la partícula individual. Esta característica de reflectividad nula se mantiene presente incluso para fracciones de cubierta de hasta el 20 %, en ambos estados de polarización. Al analizar la reflectividad de la monocapa para los cuatro materiales estudiados a incidencia normal, se encontró que los mínimos en el retroesparcimiento de la partícula aislada coinciden con los mínimos de reflectividad en la monocapa. Para la transmitancia, también a incidencia normal, se encontró que las longitudes de onda donde la partícula individual extingue la luz de manera eficiente corresponden a mínimos en el espectro de transmitancia.

En el estudio de la respuesta óptica de la monocapa soportada sobre un sustrato dieléctrico, se consideraron dos tipos de sustrato: vidrio y silicio. Se observó que en la reflectividad de las monocapas de partículas esféricas, tanto de respuesta dieléctrica como metálica, soportadas sobre el sustrato de vidrio, existen regiones donde la reflectividad es menor al 1 %, extendiéndose en un rango espectral ancho (hasta ~ 400 nm), al igual que para el caso de partículas con respuesta metálica sobre sustrato de silicio. Sin embargo, para el caso de partículas dieléctricas sobre sustrato de silicio, se observó que, cuando aparece, la ventana espectral en la que la reflectividad es menor al 1 % es muy angosta (~ 10 nm), pero se extiende para casi todos los ángulos de incidencia considerados. En particular, se encontró que la monocapa de partículas de oro (radio 130 nm, $\Theta = 9\%$) y la monocapa compuesta de partículas de bismuto (radio 130 nm, $\Theta = 10$ %), ambas soportadas sobre vidrio, disminuyen la reflectividad a valores menores al 1% en regiones que abarcan desde $\lambda = 550$ nm a $\lambda = 1,000$ nm, con tolerancia angular de 35°, para ambas polarizaciones. Fuera de la región donde la reflectividad es menor al 1 %, se observó que al colocar la monocapa sobre el vidrio, la reflectividad disminuye en promedio un ~ 70 respecto a lo que reflejaría el puro sustrato de vidrio. Análogamente, para el sustrato de silicio, se observó que las monocapas de partículas de oro o de bismuto (de radio 130 nm, $\Theta = 20\%$), disminuyen la reflectividad a valores menores al 1 % dentro de regiones que se extienden desde $\lambda = 640$ hasta $\lambda = 1,000$ nm, para ángulos menores a 35° , en ambos estados de polarización. En las regiones donde la reflectividad es mayor al 1%, la presencia de las partículas genera una disminución promedio del 80% respecto a la reflectividad del sustrato de silicio sin monocapa de partículas. Los resultados sobre metasuperficies antireflejantes fueron publicados en el Journal of the Optical Society of America B bajo el título "Broadband antireflective random metasurfaces" [36].

Dentro de las regiones en las que la reflectividad de las diferentes monocapas estudiadas es menor al 1%, existen combinaciones de longitud de onda y ángulo de incidencia, para las que la reflectividad de las monocapas es prácticamente cero. Por tanto, se observó que las metasuperficies exhiben ángulos de seudo-Brewster para ambas polarizaciones dentro del rango óptico del espectro electromagnético. El efecto se observó tanto en el caso de las monocapas suspendida en el espacio libre, como las soportadas sobre un sustrato dieléctrico. Es interesante notar que los ángulos seudo-Brewster se presentan a ángulos de incidencia menores que el ángulo de Brewster usual para los sustratos, presente sólo en polarización p. También se observó que, al incrementar el índice de refracción de la matriz, los ángulos de seudo-Brewster se recorren hacia longitudes de onda menores. Se concluye que el efecto seudo-Brewster presente en las metasuperficies estudiadas se debe a la interferencia de la radiación de los distintos multipolos inducidos en cada una de las partículas esféricas formando la monocapa.

Las metasuperficies aleatorias estudiadas muestran que el efecto de ángulo de seudo-Brewster aparece tanto al considerar partículas esféricas dieléctricas como con respuesta metálica. En el caso de monocapas con partículas dieléctricas el efecto seudo-Brewster está relacionado con la interferencia de los patrones de radiación de los dipolos eléctrico y magnético inducidos. En el caso de partículas con respuesta metálica está relacionado con la interferencia de los patrones de radiación del dipolo y cuadrupolo eléctricos inducidos en cada una de las partículas.

En este trabajo se mostró que es posible suprimir la reflectividad de un sustrato dieléctrico de manera eficiente, al adicionar una monocapa de partículas esféricas distribuidas de forma aleatoria sobre el sustrato, haciendo uso de los efectos tipo Kerker. Dado que las metasuperficies estudiadas son factibles de ser fabricadas, se planeta como trabajo a futuro la comprobación experimental de las propiedades antireflejantes de estos sistemas y la presencia de ángulos de seudo-Brewster, pensando en potenciales aplicaciones tecnológicas.

APÉNDICE A

EFECTOS TIPO KERKER EN DIFERENTES MATRICES

En la sección 1 del capítulo 2 se mostró que la aparición de resonancias de Mie depende principalmente del tamaño de la partícula, el material que la compone y la matriz que la rodea. En particular, el cambio de matriz causa corrimientos de las resonancias y favorece la aparición de resonancias de órdenes mayores al fundamental, que en aire no se observarían. Por ello, se decidió dedicar un análisis más detallado para estudiar si la aparición de nuevas resonancias, debido a cambios en la matriz, causa que los efectos tipo Kerker obtenidos en aire se pierdan o aparezcan nuevos.

A continuación se analiza el comportamiento de la eficiencia de retroesparcimiento de una partícula de silicio de radio 60 nm inmersa en una matriz de aire [Fig. A.1(a)], agua [Fig. A.1(b)] y vidrio [Fig. A.1(c)]. En las Figs. A.1 se agregan las contribuciones individuales de los coeficientes de esparcimiento a_1 (en rojo), b_1 (azul), a_2 (naranja) y b_2 (verde) junto a la eficiencia de retroesparcimiento total (línea negra). En la matriz de aire, se observa que la eficiencia de retroesparcimiento está dominada por ambas contribuciones dipolares (eléctrica y magnética). El mínimo absoluto de la eficiencia de retroesparcimiento se localiza alrededor de $\lambda = 559$ nm, además de un mínimo relativo alrededor de $\lambda = 420$ nm. Al incrementar el índice de refracción de la matriz a $n_m = 1.33$ (matriz de agua), aparecen resonancias del CE [a_2 en la Figs. A.1] y CM [b_2 en la Figs. A.1], siendo la resonancia del CE la que aparece para longitudes de onda menores. Cabe mencionar que a pesar de la aparición de las resonancias cuadrupolares, el esparcimiento localizados alrededor de $\lambda = 415$ nm y $\lambda = 559.1$ nm. Finalmente, en la matriz de vidrio [Fig. A.1(c)], la resonancia del CM aumenta su magnitud, y los mínimos de la eficiencia de retroesparcimiento se localizan alrededor de $\lambda = 403$ nm y $\lambda = 558.9$ nm.

En las Figs. A.1 también se presentan los patrones de radiación para las longitudes de onda donde la eficiencia de retroesparcimiento es mínima. En las Figs. A.1(d–f) se señala el vector de onda incidente con una flecha azul y el campo eléctrico incidente con una flecha roja. Los patrones de radiación en la Fig. A.1(d) corresponden a la partícula de silicio inmersa en aire, considerando las longitudes de onda $\lambda = 420$ nm y $\lambda = 559.2$ nm. Se observa que sólo para $\lambda = 559.2$ nm se minimiza el retroesparcimiento debido a la interferencia de los dipolos eléctrico y magnético. Al considerar que la partícula está inmersa en una matriz de agua, los patrones de radiación para cada mínimo del retroesparcimiento se muestran en la Fig. A.1(e). Alrededor de $\lambda = 415$ nm y $\lambda = 559.1$ nm se obtiene la reducción del retroesparcimiento respecto al esparcimiento frontal. La distribución de la radiación en $\lambda = 415$ nm sugiere que, además de la interferencia entre ambos dipolos, están presente los cuadrupolos. Por último, la Fig. A.1(f) contiene los patrones de radiación para la partícula inmersa en vidrio, para $\lambda = 403$ nm y $\lambda = 558.9$ nm. Para ambas longitudes de onda, el retroesparcimiento se aproxima a cero. En $\lambda = 403$ nm, se aprecia una mayor influencia de los cuadrupolos eléctrico y magnético, puesto que la magnitud de la resonancia

CAPÍTULO A • EFECTOS TIPO KERKER EN DIFERENTES MATRICES



Fig. A.1: Eficiencia de retroesparcimiento (línea negra) de una partícula esférica de silicio de radio 60 nm inmersa en (a) una matriz de aire $(n_m = 1)$, (b) una matriz de agua $(n_m = 1.33)$ y (c) una matriz de vidrio $(n_m = 1.5)$. Se agregan las contribuciones individuales de los coeficientes de Mie a_1 (rojo), a_2 (naranja), b_1 (azul) y b_2 (verde). Se presentan también patrones de radiación para las longitudes de onda donde la eficiencia de retroesparcimiento es mínimo: (d) $\lambda = 420$ nm y $\lambda = 559.2$ nm (matriz de aire), (e) $\lambda = 415$ nm y $\lambda = 559.1$ nm (matriz de agua), y (f) $\lambda = 403$ nm y $\lambda = 558.9$ nm (matriz de vidrio).

aumenta. En resumen, la condición de Kerker obtenida en aire ($\lambda = 559.2$ nm) se preserva al aumentar el índice de refracción de la matriz, aunque hay un ligero corrimiento hacia el azul.

Por otro lado, al considerar una partícula esférica de bismuto de radio 130 nm, se observa que los cambios en la eficiencia de retroesparcimiento son más evidentes que en el caso de silicio. En la Fig. A.2 se muestran cálculos de la eficiencia de retroesparcimiento (línea negra) para la partícula de bismuto de radio 130 nm inmersa en aire [Fig. A.2(a)], agua [Fig. A.2(b)] y vidrio [Fig. A.2(c)], así como las contribuciones del DE (a_1 , curva roja), QE (a_2 , curva naranja), OE (a_3 , curva amarilla), DM (b_1 , curva azul), CM (b2, curva verde), OM (b3, curva magenta) para cada caso. En el caso de la matriz de aire se obtiene sólo un mínimo del retroesparcimiento alrededor de $\lambda = 490$ nm, cuyo patrón de radiación se muestra en la Fig. A.2(d). Este mínimo de retroesparcimiento se debe a la interferencia entre el DE y CE, siendo también los multipolos de contribución mayor. En cambio, con la matriz de agua se localizan dos mínimos en la eficiencia de retroesparcimiento alrededor de $\lambda = 398.4$ nm y $\lambda = 644.5$ nm. Se observa también que las contribuciones de mayor magnitud corresponden al DE, CE y OE. Para la matriz de vidrio, igualmente se localizan dos máximos que están corridos al rojo respecto al caso del agua: $\lambda = 449.2$ nm y $\lambda = 725.6$ nm. El aumento del índice de refracción propicia la aparición de la resonancia del OE, permitiendo que su magnitud sea comparable o mayor respecto a las resonancias del DE o del CE. Es interesante notar la aparición gradual de una resonancia del DM (curva azul) al aumentar el índice de refracción, ver Figs. A.2(b, c). En las Figs. A.2(d-f) se muestran los patrones de radiación correspondientes a los mínimos de la eficiencia de retroesparcimiento obtenidos para las matrices de aire, agua y vidrio, respectivamente. Es interesante notar en los casos de matriz de agua [Fig. A.2(e)] y vidrio [Fig. A.2(f)] que los mínimos de retroesparcimiento localizados para longitudes de onda menores ($\lambda = 398.4$ nm y $\lambda = 449.2$ nm, respectivamente) producen patrones de radiación de mayor direccionalidad respecto a los obtenidos con los mínimos localizados a longitudes de onda mayores, debido a la presencia de la resonancia del OE.

A diferencia de la partícula de silicio, en la partícula de bismuto, el incremento del índice de refracción de la matriz causa corrimientos evidentes de la longitud de onda para la cual aparece el efecto tipo



Fig. A.2: Eficiencia de retroesparcimiento (línea negra) de una partícula esférica de bismuto de radio 130 nm inmersa en (a) una matriz de aire $(n_m = 1)$, (b) una matriz de agua $(n_m = 1.33)$ y (c) una matriz de vidrio $(n_m = 1.5)$. Se agregan las contribuciones individuales de los coeficientes de Mie a_1 (rojo), a_2 (naranja), a_3 (amarillo), b_1 (azul), b_2 (verde) y b_3 (magenta). Se presentan también patrones de radiación para las longitudes de onda donde la eficiencia de retroesparcimiento es mínimo: (d) $\lambda = 490$ nm (matriz de aire), (e) $\lambda = 398.4$ nm y $\lambda = 644.5$ nm (matriz de agua), y (f) $\lambda = 449.2$ nm y $\lambda = 725.6$ nm (matriz de vidrio).

Kerker y propicia la aparición de nuevos mínimos de retroesparcimiento. En la sección 1 del capítulo 2 se obtuvo que las resonancias en las partículas dieléctricas sufren ligeros corrimientos al aumentar el índice de refracción de la matriz. En cambio, en las partículas con respuesta metálica se observó que los corrimientos pueden ser de hasta 400 nm. Por ello, los efectos tipo Kerker en una partícula dieléctrica resultan ligeramente afectados por el cambio en índice de refracción, mientras que en las partículas metálicas, los cambios son más evidentes.

APÉNDICE B

ÁNGULO DE INCIDENCIA MÁXIMO

Cuando incide luz de manera oblicua sobre una partícula esférica, la partícula proyecta una sombra. El modelo de esparcimiento coherente no considera los efectos debidos a las sombras que se proyectan de unas partículas sobre otras a ángulos de incidencia grandes. Por lo tanto, para ciertos parámetros de la monocapa (radio de partícula y fracción de cubierta) el modelo podría no predecir la reflectividad y transmitancia coherente de manera confiable. Para estimar el ángulo de incidencia máximo, en la Fig. B.1 se muestra un esquema de dos partículas esféricas del mismo radio *a*; cada una se indica con los números 1 y 2. Se asume que sobre las partículas incide una onda electromagnética (EM) cuyo vector de onda (\mathbf{k}_i) se indica con la flecha rojo obscuro. La línea roja indica la sombra proyectada por la esfera 1 sobre la esfera 2. El ángulo de incidencia se mide respecto a la normal al plano que contiene los centros de las esferas, en este caso la dirección normal es $\hat{\mathbf{e}}_z$. El ángulo de incidencia máximo $\theta_i^{máx}$ se forma antes de que la sombra se proyecte sobre la partícula 2, como se muestra en la Fig. B.1.



Fig. B.1: Ángulo de incidencia máximo considerando una fracción de cubierta $\Theta = 0.2$. Se consideran dos partículas esféricas idénticas de radio *a*. La separación entre sus superficies es 2*a*. La onda EM que incide sobre las partículas tiene un vector de onda incidente $\hat{\mathbf{k}}_i$ (flecha rojo obscuro) y forma un ángulo $\theta_i^{máx}$ con la normal ($\hat{\mathbf{e}}_z$) al plano que contiene los centros de las partículas. La línea roja señala la sombra proyectada por la esfera 1 sobre la esfera 2.

Con el propósito de determinar el ángulo $\theta_i^{máx}$ se utiliza la longitud de la base (l_1) y de la altura (l_2) del triángulo formado por la línea roja con las líneas punteadas azules; una de las líneas azules es paralela al eje que contiene a los centros de las partículas (\hat{e}_y , línea gris punteada) y la otra a la normal (\hat{e}_z). Se agregan líneas negras de guía donde cada división es igual al radio de la partícula. Para el cálculo resulta necesario conocer la distancia promedio mínima entre las partículas, que corresponde a la distancia entre la superficie de dos partículas. La fracción de cubierta Θ (área proyectada por todas las esferas sobre el área de la placa) se utiliza para determinar la distancia promedio a través de la Ec. (1.131). En la tabla B.1

se muestra el cociente entre la distancia promedio entre partículas y su radio *a*, para fracciones de cubierta entre 1 % y 25 %. La fracción de cubierta más alta usada durante los cálculos de las propiedades ópticas es 20 %, por ello, para tal valor se calcula $\theta_i^{máx}$. Puesto que con $\Theta = 20$ %, $\langle D_{min} \rangle = 1.96a \approx 2a$, la longitud l_1 es aproximadamente 3.22a y $l_2 \approx 1.87a$. Por tanto, el ángulo máximo $\theta_i^{máx} = \arctan(l_1/l_2)$ se estima como $\theta_i^{máx} \approx 59.85^\circ \approx 60^\circ$.

Θ	1%	5%	10 %	15 %	20 %	25 %
$\left< D_{mín} \right> / a$	15.72	5.93	3.60	2.58	1.96	1.55

Tabla B.1: Cociente entre la distancia promedio $\langle D_{min} \rangle$ entre las partículas y el radio *a* de las partículas idénticas, en una monocapa con fracción de cubierta Θ .

BIBLIOGRAFÍA

- [1] C. F. Bohren y D. R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 1998 [Citado en páginas 1, 4, 14-24].
- [2] H. C. Van de Hulst. *Light scaterring by small particles*. Dover Publications, 1981 [Citado en páginas 1, 14, 20, 30].
- [3] L. Novotny y B. Hecht. *Principles of nano-optics*. Cambridge University Press, 2006 [Citado en página 1].
- [4] Beyond metamaterials. *Nat. Mater.*, 5(10):763-764, 2006. DOI: 10.1038/nmat1740 [Citado en página 1].
- [5] H. T. Chen, A. J. Taylor y N. Yu. A review of metasurfaces: Physics and applications. *Reports Prog. Phys.*, 79(7), 2016. DOI: 10.1088/0034-4885/79/7/076401 [Citado en página 1].
- [6] L. Novotny y N. van Hulst. Antennas for light. *Nat. Photonics*, 5(2):83-90, 2011. DOI: 10.1038/ nphoton.2010.237 [Citado en página 1].
- [7] S. Hayashi y T. Okamoto. Plasmonics: Visit the past to know the future. *J. Phys. D. Appl. Phys.*, 45(43):433001, 2012. DOI: 10.1088/0022-3727/45/43/433001 [Citado en páginas 1, 25].
- [8] J. N. Anker, W. P. Hall, O. Lyandres, N. C. Shah, J. Zhao y R. P. Van Duyne. Biosensing with plasmonic nanosensors. *Nat. Mater.*, 7, 2008. DOI: 10.1038/nmat2162 [Citado en página 1].
- [9] A. Kabashin, P. Evans, S. Pastkovsky, W. Hendren, G. A. Wurtz, R. Atkinson, R. Pollard, V. A. Podolskiy y A. V Zayats. Plasmonic nanorod metamaterials for biosensing. *Nat. Mater.*, 8:867-871, 2009. DOI: 10.1038/nmat2546 [Citado en página 1].
- [10] H. Atwater y A. Polman. Plasmonics for improved photovoltaic devices. *Nat. Mater.*, 9(3):205-213, 2010. DOI: 10.1038/nmat2629 [Citado en página 1].
- [11] X. Ren, J. Cheng, S. Zhang, X. Li, T. Rao, L. Huo, J. Hou y W. C. H. Choy. High Efficiency Organic Solar Cells Achieved by the Simultaneous Plasmon-Optical and Plasmon-Electrical Effects from Plasmonic Asymmetric Modes of Gold Nanostars. *Small*, 12(37):5200-5207, 2016. DOI: 10.1002/smll.201601949 [Citado en página 1].
- [12] D. J. de Aberasturi, A. B. Serrano-Montes y L. M. Liz-Marzán. Modern Applications of Plasmonic Nanoparticles: From Energy to Health. Adv. Opt. Mater., 3(5):602-617, 2015. DOI: 10.1002/ adom.201500053 [Citado en página 1].
- [13] A. F. Bagley, S. Hill, G. S. Rogers y S. N. Bhatia. Plasmonic Photothermal Heating of Intraperitoneal Tumors through the Use of an Implanted Near-Infrared Source. ACS Nano, 7(9):8089-8097, 2013. DOI: 10.1021/nn4033757 [Citado en página 1].
- [14] X. Huang, P. K. Jain, I. H. El-Sayed y M. A. El-Sayed. Plasmonic photothermal therapy (PPTT) using gold nanoparticles. *Lasers in Medical Science*, 23(3):217, 2007. DOI: 10.1007/s10103-007-0470-x [Citado en página 1].
- [15] M. Kauranen y A. V. Zayats. Nonlinear plasmonics. *Nat. Photonics*, 6(11):737-748, 2012. DOI: 10.1038/nphoton.2012.244 [Citado en página 1].
- [16] I. Staude, T. Pertsch e Y. S. Kivshar. All-Dielectric Resonant Meta-Optics Lightens up. ACS Photonics, 6(4):802-814, 2019. DOI: 10.1021/acsphotonics.8b01326 [Citado en página 1].

- [17] A. García-Etxarri, R. Gómez-Medina, L. S. Froufe-Pérez, C. López, L. Chantada, F. Scheffold, J. Aizpurua, M. Nieto-Vesperinas y J. J. Sáenz. Strong magnetic response of submicron Silicon particles in the infrared. *Opt. Express*, 19(6):4815, 2011. DOI: 10.1364/oe.19.004815 [Citado en páginas 1, 25, 27-31].
- [18] A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, Y. H. Fu, J. Zhang y B. Lukyanchukl. Magnetic light. Sci. Rep., 2:1-6, 2012. DOI: 10.1038/srep00492 [Citado en páginas 1, 2, 27, 28].
- [19] I. Brener, S. Liu, I. Staude, J. Valentine y C. Holloway, eds. *Dielectric Metamaterials. Fundamentals, Designs, and Applications.* Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, 2019 [Citado en páginas 1, 13, 24, 25, 28-30, 32, 33, 36-38].
- [20] A. M. Urbas, Z. Jacob, L. D. Negro, N. Engheta, A. D. Boardman, P. Egan, A. B. Khanikaev, V. Menon, M. Ferrera, N. Kinsey, C. Devault, J. Kim, V. Shalaev, A. Boltasseva, J. Valentine, C. Pfeiffer, A. Grbic, E. Narimanov, L. Zhu, S. Fan, A. Alù, E. Poutrina, N. M. Litchinitser, M. A. Noginov, K. F. Macdonald, E. Plum, X. Liu, P. F. Nealey, C. R. Kagan, C. B. Murray, D. A. Pawlak, I. I. Smolyaninov, V. N. Smolyaninova y D. Chanda. Roadmap on optical metamaterials. *J. Opt.*, 18(9), 2016. DOI: 10.1088/2040-8978/18/9/093005 [Citado en página 1].
- [21] N. Yu y F. Capasso. Flat optics with designer metasurfaces. *Nat. Mater.*, 13(2):139-150, 2014. DOI: 10.1038/nmat3839 [Citado en página 1].
- [22] M. Jang, Y. Horie, A. Shibukawa, J. Brake, Y. Liu, S. M. Kamali, A. Arbabi, H. Ruan, A. Faraon y C. Yang. Wavefront shaping with disorder-engineered metasurfaces. *Nat. Photonics*, 12(2):84-90, 2018. DOI: 10.1038/s41566-017-0078-z [Citado en página 1].
- [23] B. Sain, C. Meier y T. Zentgraf. Nonlinear optics in all-dielectric nanoantennas and metasurfaces: a review. *Adv. Photonics*, 1(02):1, 2019. DOI: 10.1117/1.ap.1.2.024002 [Citado en página 1].
- [24] K. Baek, Y. Kim, S. Mohd-Noor y J. K. Hyun. Mie Resonant Structural Colors. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 12(5):5300-5318, 2020. DOI: 10.1021/acsami.9b16683 [Citado en página 1].
- [25] A. K. González-Alcalde y A. Reyes-Coronado. Large angle-independent structural colors based on all-dielectric random metasurfaces. *Opt. Commun.*, 475:126289, 2020 [Citado en página 1].
- [26] J. Proust, F. Bedu, B. Gallas, I. Ozerov y N. Bonod. All-Dielectric Colored Metasurfaces with Silicon Mie Resonators. ACS Nano, 10(8):7761-7767, 2016. DOI: 10.1021/acsnano.6b03207 [Citado en página 1].
- [27] J. Sun, B. Bhushan y J. Tong. Structural coloration in nature. *RSC Adv.*, 3:14862-14889, 35 2013.
 DOI: 10.1039/C3RA41096J [Citado en páginas 1, 2].
- [28] C. S. Ho, A. Garcia-Etxarri, Y. Zhao y J. Dionne. Enhancing Enantioselective Absorption Using Dielectric Nanospheres. ACS Photonics, 4(2):197-203, 2017. DOI: 10.1021/acsphotonics. 6b00701 [Citado en página 1].
- [29] M. L. Solomon, J. Hu, M. Lawrence, A. García-Etxarri y J. A. Dionne. Enantiospecific Optical Enhancement of Chiral Sensing and Separation with Dielectric Metasurfaces. ACS Photonics, 6(1):43-49, 2019. DOI: 10.1021/acsphotonics.8b01365 [Citado en página 1].
- [30] W. Liu, A. E. Miroshnichenko, D. N. Neshev e Y. S. Kivshar. Broadband unidirectional scattering by magneto-electric core-shell nanoparticles. ACS Nano, 6(6):5489-5497, 2012. DOI: 10.1021/ nn301398a [Citado en páginas 2, 51].
- [31] M. Kerker, D. S. Wang y C. L. Giles. Electromagnetic Scattering By Magnetic Spheres. J. Opt. Soc. Am., 73(6):765-767, 1983. DOI: 10.1364/JOSA.73.000765 [Citado en páginas 2, 5, 28].
- [32] Y. H. Fu, A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, Y. F. Yu y B. Luk'yanchuk. Directional visible light scattering by silicon nanoparticles. *Nat. Commun.*, 4:1-6, 2013. DOI: 10.1038/ncomms2538 [Citado en páginas 2, 29].

- [33] S. Person, M. Jain, Z. Lapin, J. J. Sáenz, G. Wicks y L. Novotny. Demonstration of Zero Optical Backscattering from Single Nanoparticles. *Nano Lett.*, 13(4):1806-1809, 2013. DOI: 10.1021/ n14005018 [Citado en páginas 2, 29].
- [34] W. Liu e Y. S. Kivshar. Generalized Kerker effects in nanophotonics and meta-optics [Invited]. Opt. Express, 26(10):13085, 2018. DOI: 10.1364/oe.26.013085 [Citado en páginas 2, 29, 33-35].
- [35] H. K. Shamkhi, A. Sayanskiy, A. C. Valero, A. S. Kupriianov, P. Kapitanova, Y. S. Kivshar, A. S. Shalin y V. R. Tuz. Transparency and perfect absorption of all-dielectric resonant metasurfaces governed by the transverse Kerker effect. *Phys. Rev. Materials*, 3:085201, 2019. DOI: 10.1103/ PhysRevMaterials.3.085201 [Citado en página 2].
- [36] A. K. González-Alcalde, I. Y. Rojas-Martinez y A. Reyes-Coronado. Broadband antireflective random metasurfaces. J. Opt. Soc. Am. B, 38(6):1974-1983, 2021. DOI: 10.1364/JOSAB.420085 [Citado en páginas 2, 106, 108].
- [37] K. V. Baryshnikova, M. I. Petrov, V. E. Babicheva y P. A. Belov. Plasmonic and silicon spherical nanoparticle antireflective coatings. *Sci. Rep.*, 6(March):1-11, 2016. DOI: 10.1038/srep22136 [Citado en páginas 2, 105, 106].
- [38] R. Paniagua-Domínguez, Y. F. Yu, A. E. Miroshnichenko, L. A. Krivitsky, Y. H. Fu, V. Valuckas, L. Gonzaga, Y. T. Toh, A. Y. S. Kay, B. Lukyanchuk y A. I. Kuznetsov. Generalized Brewster effect in dielectric metasurfaces. *Nat. Commun.*, 7, 2016. DOI: 10.1038/ncomms10362 [Citado en páginas 2, 3, 35, 36, 38, 95].
- [39] P. R. Wray y H. A. Atwater. Light-Matter Interactions in Films of Randomly Distributed Unidirectionally Scattering Dielectric Nanoparticles. ACS Photonics, 7(8):2105-2114, 2020. DOI: 10.1021/acsphotonics.0c00545 [Citado en páginas 3, 95].
- [40] J. Toudert, R. Serna y M. Jiménez De Castro. Exploring the optical potential of nano-bismuth: Tunable surface plasmon resonances in the near ultraviolet-to-near infrared range. J. Phys. Chem. C, 116(38):20530-20539, 2012. DOI: 10.1021/jp3065882 [Citado en páginas 4, 62].
- [41] J. Toudert, R. Serna, I. Camps, J. Wojcik, P. Mascher, E. Rebollar y T. A. Ezquerra. Unveiling the Far Infrared-to-Ultraviolet Optical Properties of Bismuth for Applications in Plasmonics and Nanophotonics. J. Phys. Chem. C, 121(6):3511-3521, 2017. DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b10331 [Citado en páginas 4, 62].
- [42] M. Jiménez de Castro, F. Cabello, J. Toudert, R. Serna y E. Haro-Poniatowski. Potential of bismuth nanoparticles embedded in a glass matrix for spectral-selective thermo-optical devices. *Appl. Phys. Lett.*, 105(11):113102, 2014. DOI: 10.1063/1.4895808 [Citado en página 4].
- [43] A. Cuadrado, J. Toudert y R. Serna. Polaritonic-to-Plasmonic Transition in Optically Resonant Bismuth Nanospheres for High-Contrast Switchable Ultraviolet Meta-Filters. *IEEE Photonics J.*, 8(3):1-11, 2016. DOI: 10.1109/JPH0T.2016.2574777 [Citado en página 4].
- [44] Z. Wang, C. Jiang, R. Huang, H. Peng y X. Tang. Investigation of Optical and Photocatalytic Properties of Bismuth Nanospheres Prepared by a Facile Thermolysis Method. J. Phys. Chem. C, 118(2):1155-1160, 2014. DOI: 10.1021/jp4065505 [Citado en página 4].
- [45] F. Dong, T. Xiong, Y. Sun, Z. Zhao, Y. Zhou, X. Feng y Z. Wu. A semimetal bismuth element as a direct plasmonic photocatalyst. *Chem. Commun.*, 50:10386-10389, 2014. DOI: 10.1039/ C4CC02724H [Citado en página 4].
- [46] U.S. Geological Survey. *Mineral commodity summaries 2020*. 2020. DOI: 10.3133/mcs2020
 [Citado en página 4].
- [47] A. Reyes-Coronado, G. Morales-Luna, O. Vázquez-Estrada, A. García-Valenzuela y R. G. Barrera. Analytical modeling of optical reflectivity of random plasmonic nano-monolayers. *Opt. Express*, 26(10):12660, 2018. DOI: 10.1364/oe.26.012660 [Citado en páginas 4, 5, 38-43, 45].

- [48] A. García-Valenzuela, E. Gutiérrez-Reyes y R. G. Barrera. Multiple-scattering model for the coherent reflection and transmission of light from a disordered monolayer of particles. J. Opt. Soc. Am. A, 29(6):1161, 2012. DOI: 10.1364/josaa.29.001161 [Citado en páginas 5, 38, 42-44].
- [49] J. D. Jackson. *Classical electrodynamics*. 3.^a ed. John Wiley & Sons, 1999 [Citado en página 5].
- [50] D. J. Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. 4.ª ed. Pearson, 2013 [Citado en páginas 6, 8, 25].
- [51] E. Hecht. Optics. 4.ª ed. Addison Wesley, 1998 [Citado en páginas 6, 8-13].
- [52] M. Born y E. Wolf. *Principle of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light.* 7.ª ed. Cambridge University Press, 2005 [Citado en páginas 7, 10, 13].
- [53] L. Thirion-Lefevre y R. Guinvarc'h. The double Brewster angle effect. *Comptes Rendus Phys.*, 19(1-2):43-53, 2018. DOI: 10.1016/j.crhy.2018.02.003 [Citado en página 13].
- [54] G. Mie. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. Ann. Phys., 330(3):377–445, 1908. DOI: 10.1002/andp.19083300302 [Citado en página 14].
- [55] H. Horvath. Gustav Mie and the scattering and absorption of light by particles: Historic developments and basics. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf., 110(11):787–799, 2009. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2009.02.022 [Citado en página 14].
- [56] L. Tsang, J. A. Kong y K. H. Ding. Scattering of electromagnetic Waves: Theories and applications. John Wiley & Sons, 2000 [Citado en página 15].
- [57] R. G. Barrera, G. A. Estevez y J Giraldo. Vector spherical harmonics and their application to magnetostatics. *Eur. J. Phys.*, 6(4):287–294, 1985. DOI: 10.1088/0143-0807/6/4/014 [Citado en página 17].
- [58] M. Kerker. *The scattering of light and other electromagnetic radiation*. Ed. por E. M. Loebl. Academic Press, 1969 [Citado en páginas 19, 20].
- [59] R. Ali. Revisit of generalized Kerker's conditions using composite metamaterials. J. Opt., 22(8):085102, 2020. DOI: 10.1088/2040-8986/ab9d14 [Citado en página 24].
- [60] Y. Kivshar y A. Miroshnichenko. Meta-Optics with Mie Resonances. *Opt. Photon. News*, 28(1):24-31, 2017. DOI: 10.1364/0PN.28.1.000024 [Citado en páginas 25-28].
- [61] M. Marković y A. Rakić. Determination of optical properties of aluminium including electron reradiation in the Lorentz-Drude model. *Opt. Laser Technol.*, 22(6):394–398, 1990. DOI: https: //doi.org/10.1016/0030-3992(90)90093-J [Citado en página 25].
- [62] M. Decker e I. Staude. Resonant dielectric nanostructures: A low-loss platform for functional nanophotonics. J. Opt., 18(10), 2016. DOI: 10.1088/2040-8978/18/10/103001 [Citado en páginas 26, 28-30, 33].
- [63] A. B. Evlyukhin, S. M. Novikov, U. Zywietz, R. L. Eriksen, C. Reinhardt, S. I. Bozhevolnyi y B. N. Chichkov. Demonstration of magnetic dipole resonances of dielectric nanospheres in the visible region. *Nano Lett.*, 12(7):3749-3755, 2012. DOI: 10.1021/nl301594s [Citado en páginas 27, 28].
- [64] A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, M. L. Brongersma, Y. S. Kivshar y B. Luk'yanchuk. Optically resonant dielectric nanostructures. *Science*, 354(6314), 2016. DOI: 10.1126/science. aag2472 [Citado en página 28].
- [65] B. Hopkins, A. E. Miroshnichenko e Y. S. Kivshar. All-dielectric nanophotonic structures: Exploring the magnetic component of light. En: *Springer Ser. Opt. Sci.* Vol. 204. Springer Verlag, 2017, 285-313. DOI: 10.1007/978-3-319-55438-9_10 [Citado en página 28].
- [66] J. B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins y W. J. Stewart. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, 47(11):2075-2084, 1999. DOI: 10.1109/22.798002 [Citado en página 29].

- [67] R. Gómez-Medina, B. García-Cámara, I. Suárez-Lacalle, L. S. Froufe-Pérez, F. González, F. Moreno, M. Nieto-Vesperinas y J. J. Sáenz. Electric and magnetic optical response of dielectric nanospheres: Optical forces and scattering anisotropy. *Photonics Nanostruct.*, 10(4):345-352, 2012. DOI: 10.1016/j.photonics.2012.05.009 [Citado en página 29].
- [68] B. T. Draine. The discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains. *Astrophys. J.*, 333:848-872, 1988 [Citado en página 29].
- [69] M. Nieto-Vesperinas, R. Gomez-Medina y J. J. Saenz. Angle-suppressed scattering and optical forces on submicrometer dielectric particles. J. Opt. Soc. Am. A, 28(1):54, 2011. DOI: 10.1364/ josaa.28.000054 [Citado en página 29].
- [70] J. Y. Lee, A. E. Miroshnichenko y R.-K. Lee. Simultaneously nearly zero forward and nearly zero backward scattering objects. *Opt. Express*, 26(23):30393, 2018. DOI: 10.1364/oe.26.030393 [Citado en páginas 30, 35].
- [71] N. Engheta y A. Alù. How does zero forward-scattering in magnetodielectric nanoparticles comply with the optical theorem? J. Nanophoton., 4(1):041590, 2010. DOI: 10.1117/1.3449103 [Citado en página 30].
- [72] B. García-Cámara, R. A. de la Osa, J. M. Saiz, F. González y F. Moreno. Directionality in scattering by nanoparticles: Kerker's null-scattering conditions revisited. *Opt. Lett.*, 36(5):728, 2011. DOI: 10.1364/o1.36.000728 [Citado en página 30].
- [73] R. Ali. *Revisit of generalized Kerker's conditions using composite metamaterials*. 2020. arXiv: 2006.07307 [physics.optics] [Citado en página 30].
- [74] J. A. Stratton. *Electromagnetic theory*. Wiley–IEEE Press, 2007 [Citado en página 30].
- [75] J. Y. Lee, A. E. Miroshnichenko y R. K. Lee. Reexamination of Kerker's conditions by means of the phase diagram. *Phys. Rev. A*, 96(4):1-7, 2017. DOI: 10.1103/PhysRevA.96.043846 [Citado en página 33].
- [76] W. Liu. Generalized Magnetic Mirrors. *Phys. Rev. Lett.*, 119:123902, 2017. DOI: 10.1103/ PhysRevLett.119.123902 [Citado en página 35].
- [77] R. Alaee, R. Filter, D. Lehr, F. Lederer y C. Rockstuhl. A generalized Kerker condition for highly directive nanoantennas. *Opt. Lett.*, 40(11):2645, 2015. DOI: 10.1364/o1.40.002645 [Citado en página 35].
- [78] B. Luk'Yanchuk, N. I. Zheludev, S. A. Maier, N. J. Halas, P. Nordlander, H. Giessen y C. T. Chong. The Fano resonance in plasmonic nanostructures and metamaterials. *Nat. Mater.*, 9(9):707-715, 2010. DOI: 10.1038/nmat2810 [Citado en página 35].
- [79] H. K. Shamkhi, K. V. Baryshnikova, A. Sayanskiy, P. Kapitanova, P. D. Terekhov, P. Belov, A. Karabchevsky, A. B. Evlyukhin, Y. Kivshar y A. S. Shalin. Simultaneous suppression of forward and backward light scattering by high-index nanoparticles based on Kerker-like effects. *J. Phys. Conf. Ser.*, 1461(1), 2020. DOI: 10.1088/1742-6596/1461/1/012158 [Citado en página 35].
- [80] C. L. Giles y W. J. Wild. Brewster angles for magnetic media. *Int. J. Infrared Millimeter Waves*, 6(3):187-197, 1985. DOI: 10.1007/BF01010357 [Citado en página 35].
- [81] J. Futterman. Magnetic Brewster angle. Am. J. Phys., 63(5):471-471, 1995. DOI: 10.1119/1.
 17915 [Citado en página 35].
- [82] G. P. Sastry y S. Chakrabarty. The generalised Brewster condition from the extinction theorem. *Eur. J. Phys.*, 8(2):125-127, 1987. DOI: 10.1088/0143-0807/8/2/009 [Citado en página 36].
- [83] R. G. Barrera y A. García-Valenzuela. Coherent reflectance in a system of random Mie scatterers and its relation to the effective-medium approach. J. Opt. Soc. Am. A, 20(2):296, 2003. DOI: 10.1364/josaa.20.000296 [Citado en página 39].

- [84] J. A. Urrutia Anguiano. Estudio del modo plasmónico colectivo en sistemas monocapa desordenados formados por nanopartículas esféricas y su análisis para biosensado. Tesis de licenciatura. Universidad Nacional Autónoma de México, 2019 [Citado en página 40].
- [85] O. Vázquez-Estrada y A. García-Valenzuela. Optical reflectivity of a disordered monolayer of highly scattering particles: coherent scattering model versus experiment. J. Opt. Soc. Am. A, 31(4):745-754, 2014. DOI: 10.1364/JOSAA.31.000745 [Citado en página 43].
- [86] I. Staude y J. Schilling. Metamaterial-inspired silicon nanophotonics. *Nat. Photonics*, 11(5):274-284, 2017. DOI: 10.1038/nphoton.2017.39 [Citado en página 47].
- [87] E. Palik. *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press, 1998 [Citado en páginas 47, 53, 80].
- [88] D. E. Aspnes y J. B. Theeten. Optical Properties of the Interface between Si and Its Thermally Grown Oxide. *Phys Rev Lett*, 43:1046–1050, 14 1979. DOI: 10.1103/PhysRevLett.43.1046 [Citado en páginas 47, 48].
- [89] W. Primak. Refractive Index of Silicon. *Appl Opt*, 10(4):759–763, 1971. DOI: 10.1364/A0.10.
 000759 [Citado en páginas 47, 48].
- [90] D. F. Edwards y E. Ochoa. Infrared refractive index of silicon. *Appl Opt*, 19(24):4130–4131, 1980.
 DOI: 10.1364/A0.19.004130 [Citado en páginas 47, 48].
- [91] G. Leveque y D. A. Lynch. *private communication*. 1982 [Citado en página 53].
- [92] W. J. Choyke y L. Patrick. Refractive Index and Low-Frequency Dielectric Constant of 6H SiC. J. Opt. Soc. Am., 58(3):377–379, 1968. DOI: 10.1364/JOSA.58.000377 [Citado en página 53].
- [93] P. T. B. Shaffer. Refractive Index, Dispersion, and Birefringence of Silicon Carbide Polytypes. *Appl Opt*, 10(5):1034–1036, 1971. DOI: 10.1364/A0.10.001034 [Citado en página 53].
- [94] N. W. Thibault. Morphological and structural crystallography and optical properties of silicon carbide (SiC)*. Am Mineral, 29(9–10):327–362, 1944. eprint: https://pubs.geoscienceworld. org/ammin/article-pdf/29/9-10/327/4243453/am-1944-327.pdf [Citado en página 53].
- [95] W. G. Spitzer, D. Kleinman y D. Walsh. Infrared Properties of Hexagonal Silicon Carbide. Vol. 113. American Physical Society, 1959, 127-132. DOI: 10.1103/PhysRev.113.127 [Citado en página 53].
- [96] P. B. Johnson y R. W. Christy. Optical Constants of the Noble Metals. *Phys. Rev. B*, 6:4370–4379, 12 1972. DOI: 10.1103/PhysRevB.6.4370 [Citado en páginas 58, 59].
- [97] W. S. Werner, K. Glantschnig y C. Ambrosch-Draxl. Optical constants and inelastic electronscattering data for 17 elemental metals. J. Phys. Chem. Ref. Data, 38(4):1013-1092, 2009. DOI: 10.1063/1.3243762 [Citado en páginas 62, 63].
- [98] F. Huang, S. Drakeley, M. G. Millyard, A. Murphy, R. White, E. Spigone, J. Kivioja y J. J. Baumberg. Zero-Reflectance Metafilms for Optimal Plasmonic Sensing. *Adv. Opt. Mater.*, 4(2):328-335, 2016. DOI: 10.1002/adom.201500424 [Citado en páginas 105, 106].
- [99] P. Spinelli, M. A. Verschuuren y A. Polman. Broadband omnidirectional antireflection coating based on subwavelength surface Mie resonators. *Nat. Commun.*, 3:1-5, 2012. DOI: 10.1038/ ncomms1691 [Citado en páginas 105, 106].