



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

PROPIEDADES ÓPTICAS DE METASUPERFICIES
DESORDENADAS DE NANOPARTÍCULAS DE
ALUMINIO DEPOSITADAS SOBRE SUSTRATO DE
CUARZO

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

Físico

PRESENTA:

Amauri López Cabrera

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Alejandro Reyes Coronado



Ciudad Universitaria, Ciudad de México, 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

1. Datos del alumno

López

Cabrera

Amauri

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

413099228

2. Datos del tutor

Dr.

Alejandro

Reyes

Coronado

3. Datos del sinodal 1

Dr.

Augusto

García

Valenzuela

4. Datos del sinodal 2

Dra.

Bertha

Molina

Brito

5. Datos del sinodal 3

Dr.

Giuseppe

Pirruccio

6. Datos del sinodal 4

Dra.

Celia Angelina

Sánchez

Pérez

7. Datos del trabajo escrito

Propiedades ópticas de metasuperficies desordenadas de nanopartículas de aluminio depositadas sobre sustrato de cuarzo

páginas: 105

2022

Agradecimientos

Aprovecho estas líneas para agradecer a todos aquellos que me apoyaron en mi paso por la carrera de Física en la Facultad de Ciencias de la UNAM. También agradezco al Dr. Alejandro Reyes Coronado, profesor, asesor y amigo, así como padre académico, por creer en mí y mostrarme que estudiar física puede ser algo muy provechoso y divertido.

Agradezco al grupo de *Nanoplasmónica* del cual formé parte desde 5to semestre de la carrera y con el cual aprendí mucho sobre la interacción de la luz con la materia. Agradezco a aquellos profesores que me inspiraron con su ímpetu y amor por la ciencia a ser mejor estudiante y físico día con día. Agradezco al grupo de la *monocapa*, conformado por grandes figuras que me inspiran y seguirán inspirando mi camino en mi formación como físico. Agradezco también a todos mis compañeros con los cuales podía *ñoñear* de física a la hora de la comida y en los pasillos de la Facultad. También agradezco a todos aquellos que con su curiosidad sobre la carrera que cursaba me formulaban preguntas al respecto y enriquecían mi inquietud sobre los temas relacionados a la naturaleza. Agradezco a mis padres por haberme cuidado durante mi niñez y adolescencia, y brindarme el gran tesoro de la educación y a mis hermanos por las lecciones de vida.

Agradezco el apoyo otorgado por parte del proyecto DGAPA-UNAM PAPIIT IN107122. Asimismo agradezco tanto al Dr. Rubén Gerardo Barrera y Pérez así como al Dr. Augusto García Valenzuela por la oportunidad brindada de ser Ayudante de Investigador del SNI del CONACyT.

Agradezco al Sr. J. Luis por las interminables charlas de física, con las cuales pude reflexionar y aprender más allá de lo que hubiera aprendido, así como las lecciones de vida y la paciencia que tuvo conmigo, también a la Sra. M. del Pilar y a Carmen por la paciencia y el apoyo inconmesurable.

Agradezco a Megatón, Juana y Kalessi, por acompañarme en esas noches de desvelo y absorber mi ansiedad y preocupaciones durante toda la carrera. Por último y no menos importante, me agradezco a mí mismo porque a pesar de las adversidades seguí y seguiré creyendo en mí y en mis capacidades.

*I would rather be ashes than dust
I would rather that my spark should
burn out in a brilliant blaze than it
should be stifled by dry-rot.*

*I would rather be a superb meteor,
every atom of me in magnificent glow,
than a sleepy and permanent planet.
The function of man is to live, not to exist.
-Jack London*

*We are all broken.
That's how the light gets in.
-Ernest Hemingway*

Resumen/Abstract

En este trabajo de tesis de licenciatura se estudió la respuesta electromagnética de metasuperficies desordenadas de nanopartículas de aluminio depositadas sobre un sustrato de cuarzo. La motivación surge a partir de los resultados experimentales de absorbancia a incidencia normal publicados por Rodríguez-Gómez et al. En el artículo, mediante el método de pulverización catódica, se crecen con alta reproducibilidad monocapas desordenadas de nanopartículas de aluminio depositadas sobre cuarzo, con un ancho de distribución de tamaño de nanopartícula por debajo de 10 nm y una separación promedio entre partículas de 1 nm. Los resultados experimentales de absorbancia presentan un máximo de absorción bien definido localizado en $\lambda = 186$ nm, UV profundo. Los autores afirman que el máximo se debe al modo plasmónico dipolar de las nanopartículas individuales. En esta tesis se analiza esta conjetura.

El punto de partida fue estudiar la respuesta óptica (reflectancia y transmitancia) de una monocapa desordenada de aluminio soportada en cuarzo con la fórmula de Landau-Lifshitz. El sistema multicapa de estudio se conforma por tres medios, el primero medio es aire, el segundo medio es el sistema monocapa de aluminio embebido en aire y el tercer medio es cuarzo. Utilizando el modelo dipolar, que es un modelo de medio efectivo, se calcula la respuesta efectiva del segundo medio que contiene a las nanopartículas embebidas en una matriz, en nuestro caso aire. Simulando el sistema experimental, se calcula la absorbancia de la monocapa en función de los parámetros relevantes del problema: polarización, longitud de onda del haz incidente, ángulo de incidencia, radio y fracción de cubierta superficial de las partículas.

Posteriormente, debido a que los autores de la publicación argumentan que el máximo de absorbancia se debe al modo plasmónico dipolar de las nanopartículas individuales y con el objetivo de localizar el modo plasmónico dipolar de las mismas en el sistema monocapa, se estudió la respuesta electromagnética de una sola nanopartícula de aluminio esférica en función del radio, al ser iluminada por una onda electromagnética plana. La solución a este problema se conoce como "Teoría de Mie". En la solución propuesta por Mie, los campos eléctrico y magnético quedan determinados en todo punto del espacio en términos de una expansión de los armónicos esféricos vectoriales, cuyos coeficientes están representados a través de funciones especiales (funciones esféricas de Bessel y Hankel), que contienen la información de las resonancias plasmónicas de la partícula, también conocidas como resonancias plasmónicas de superficie localizadas. En la región UV-Vis-NIR del espectro, la respuesta óptica de una nanopartícula de aluminio con dimensiones menores a 10 nm, es dominada por el modo plasmónico dipolar.

Debido a que la separación promedio entre partículas en las muestras reportadas en el artículo

de Rodríguez-Gómez es de 1 nm, la interacción electromagnética entre partículas no se puede despreciar. Las propiedades ópticas debidas a las interacciones de las nanopartículas dependen de la distancia de separación entre partículas, por lo que, utilizando el método numérico BEM (*Boundary Element Method*), se calcularon las propiedades ópticas: secciones transversales de esparcimiento, extinción y absorción de un dímero de nanopartículas de aluminio en función de la distancia de separación. Los resultados obtenidos predicen las posiciones de los modos plasmónicos y su corrimiento en el espectro electromagnético. El análisis realizado permite entender el efecto de la variación en la fracción de cubierta en la monocapa de interés.

Por otra parte, en presencia del sustrato de cuarzo, tanto las propiedades ópticas de la nanopartículas de aluminio en función del radio, como del dímero de nanopartículas en función de la distancia se modifican. Mediante el método numérico MNPBEM (*Metal Nanoparticle Boundary Element Method*) se introducen los efectos del sustrato en ambos cálculos y se analiza el corrimiento de los modos plasmónicos.

Finalmente, se obtienen espectros de absorbancia del sistema experimental en función de la longitud de onda y la fracción de cubierta. Los resultados teóricos concuerdan cualitativamente con los resultados experimentales de absorbancia realizados por Rodríguez-Gómez et al.

In this thesis, the electromagnetic response of disordered metasurfaces made of aluminium nanoparticles supported on a quartz substrate are studied. The motivation arises from the experimental results of absorbance at normal incidence published by Rodríguez-Gómez et al. in 2017. In the publication, through a cathodic pulverization chamber, they grow with high reproducibility disordered monolayers of aluminum nanoparticles deposited on a substrate, with a spectral size distribution width under 10 nm and an average distance between particles of 1 nm. The experimental results of absorbance exhibit a well defined maximum localized at $\lambda = 186$ nm, deep UV. The authors affirm that the maximum is due to the dipolar plasmonic resonance of the individual nanoparticles. In this thesis we analyze this conjecture.

The departure point was the study of the optical response (reflectance and transmittance) of a disordered aluminum monolayer supported on quartz with the Landau-Lifshitz formula. The studied monolayer system is conformed by three media: the first medium is air, the second is the aluminum monolayer system embedded in air, and the third medium is quartz. Using the dipolar model, which is an effective medium model, the effective optical response of the second medium—the monolayer embedded in a matrix of air—is calculated. Simulating the experimental system, the absorbance of the monolayer is calculated as a function of the relevant parameters of the problem: polarization and wavelength of the incident beam, angle of incidence, radius and surface fraction of the particles.

Subsequently, because the authors of the publication argue that the maximum of absorptance is due to the dipolar plasmonic resonance of the individual nanoparticles, the electromagnetic response of a single nanoparticle is studied as a function of the radius, when the nanoparticle is illuminated by an electromagnetic plane wave. The solution to this problem is known as Mie Theory. In the solution proposed by Mie, the electric and magnetic fields are determined in every point of space in terms of an expansion of the spherical harmonic vectors, whose coefficients are given in terms of the special functions (Bessel and Hankel functions), that contain the information of the plasmonic resonances of the particle, also known as localized surface plasmon resonances. In the

UV-Vis-NIR spectrum, the optical response of a single aluminum nanoparticle with size under 10 nm, is dominated by the dipolar resonance.

The average separation between particles in the samples reported in the publication by Rodríguez-Gómez is 1 nm, then the electromagnetic interaction between particles can not be neglected. The optical properties due to the nanoparticles interaction in the monolayer depend on the separation between particles therefore, using the numerical method BEM (Boundary Element Method), the optical properties were calculated: scattering, extinction and absorption cross sections of an aluminum nanoparticle dimer as a function of the separation distance. The obtained results predict the wavelengths of the plasmonic modes and their shift as a function of the separation distance in the electromagnetic spectrum. The analysis carried out allow us to understand the effect of the variation in the surface coverage of aluminum nanoparticles in the monolayer of interest.

In the presence of a quartz substrate, both the optical properties of the nanoparticles as a function of radius and those of the nanoparticle dimer as a function of distance are modified. By means of the numerical method MNPBEM (Metal Nanoparticles Boundary Element Method), the effects of the substrate is introduced in both calculations and the shift of the plasmonics modes is analysed.

Finally, the absorptance spectra of the experimental system are obtained numerically as a function of the wavelength and the surface coverage. The theoretical results qualitatively agree numerically with the experimental results of absorptance carried out by Rodríguez-Gómez et al.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen/Abstract	VII
Introducción	1
1 Teoría	7
1.1 Leyes de reflexión y refracción de la luz	7
1.1.1 Formulación de Fresnel	10
1.2 Propagación de ondas en medios estratificados	14
1.2.1 Método de matriz de transferencia	15
1.2.2 Coeficientes de reflexión y transmisión	26
1.3 Modelo dipolar	34
1.3.1 Incidencia externa	34
1.4 Función dieléctrica	41
1.4.1 Modelo de Drude	41
1.4.2 Corrección por tamaño	44
1.5 Reflectancia, transmitancia, absorción y absorbancia	48
1.6 Teoría de Mie	49
1.7 Métodos numéricos para resolver las ecuaciones de Maxwell	60
1.7.1 Elementos básicos de la teoría BEM	60
1.7.2 Procedimiento numérico	65
1.7.3 Elementos básicos de la teoría MNPBEM	67
2 Características de las muestras previamente fabricadas	71
2.1 Fabricación de muestras	71
3 Resultados	75
3.1 Nanopartícula de aluminio aislada	76

3.1.1	Variación del radio de la nanopartícula de aluminio aislada y sobre un sustrato	77
3.2	Dímero de nanopartículas de aluminio	81
3.2.1	Propiedades ópticas de un dímero de nanopartículas de aluminio aislado y sobre un sustrato	81
3.3	Reflectancia y transmitancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio	84
3.4	Absorción y absorbancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio	89
	Conclusiones	97
	Apéndice A: Coeficientes de Mie	99
	Apéndice B: Contribución dipolar	101
	Bibliografía	105

Introducción

En el campo de la nanoplasmónica existe un gran interés por los materiales plasmónicos fabricados con aluminio debido a que sus resonancias se encuentran bien definidas en la región ultravioleta (UV) del espectro electromagnético [1], la fabricación de los materiales plasmónicos tiene un bajo costo de producción comparadas con otros materiales plasmónicos como el oro [2] y la plata [3]. En los materiales nanoplasmónicos, las resonancias se deben a las oscilaciones colectivas de los electrones en la red cristalina, también conocidas como resonancias plasmónicas de superficie localizadas. Las aplicaciones existentes para los materiales plasmónicos de aluminio varían desde la fabricación de polarizadores de banda ancha [4], espectroscopías ópticas no lineales [5], optimización de dispositivos fotovoltaicos [6], así como sensores [7].

A pesar de su potencial tecnológico, la exploración del aluminio en el área de la plasmónica todavía enfrenta desafíos científicos y técnicos. Desde el punto de vista de la fabricación, la fuerte dependencia del ancho de la resonancia plasmónica de superficie localizada con la geometría, puede ser una desventaja cuando no se tiene control sobre la distribución de tamaños y formas en el proceso de fabricación [1]. En 2017 se publicó un artículo por Rodríguez-Gómez et al., donde se propone un método de fabricación de monocapas de nanopartículas de aluminio depositadas al azar con alta reproducibilidad. Dichas monocapas se fabrican con el método de pulverización catódica en el Instituto de Física de la UNAM, lo que resulta en lo que los autores llaman una conformación exitosa de monocapa, término que hace referencia a: (a) una formación esférica o esferoide de las nanopartículas, (b) una distribución aleatoria, (c) diámetros variables siempre menores que 10 nm, y (d) distancia variable entre partículas sin aglomeraciones. Las monocapas fabricadas tienen una distribución de radios en el intervalo $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ nm, con un máximo alrededor de $a = 3.2$ nm y una distancia entre partículas promedio de 1 nm. Para corroborar que se tiene una conformación exitosa de monocapa, se utilizó la técnica de microscopía electrónica así como la microscopía de fuerza atómica como herramientas para determinar si las nanopartículas han sido depositadas en el sustrato. La caracterización óptica se realizó mediante mediciones de absorbancia a incidencia normal en el intervalo de longitudes de onda de 175 a 3,000 nm. Los espectros de absorbancia obtenidos para muestras aleatorias presentan una resonancia plasmónica bien definida en $\lambda = 186$ nm, lo que representa un indicio de la alta reproducibilidad de las monocapas. Los autores atribuyen la resonancia a la resonancia dipolar de partícula de aluminio aislada.

Lo que se propone en este trabajo de tesis de licenciatura es modelar el sistema experimental mencionado y calcular la absorbancia en configuración de iluminación externa, a incidencia normal, para un conjunto de nanopartículas de aluminio esféricas idénticas de radio $a = 3.2$ nm, en función de la longitud de onda, en el intervalo de 100 a 300 nm. Analizando las resonancias

plasmónicas para una nanopartícula de aluminio sobre cuarzo en función del radio y un dímero de nanopartículas soportados sobre cuarzo en función de la distancia, es posible argumentar la naturaleza de la resonancia plasmónica presente en los datos experimentales de absorbancia.

Plasmones en aluminio

Los metales pueden ser descritos a partir de los electrones libres del material en el estado base [8]. Los electrones libres son los responsables de las propiedades eléctricas y ópticas del material [9]. El aluminio tiene la característica de ser un material con una alta densidad de electrones libres—tiene tres electrones por átomo en la banda de conducción. Las oscilaciones colectivas de estos electrones en la red cristalina de los metales es denominada plasmón [8] y sus campos electromagnéticos satisfacen las ecuaciones de Maxwell [8], dadas por:

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{tot}}{\epsilon_0}, \quad \text{Ley de Gauss eléctrica} \quad (1a)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad \text{Ley de Gauss magnética} \quad (1b)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \text{Ley de Faraday-Lenz} \quad (1c)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_{tot} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad \text{Ley de Ampère-Maxwell,} \quad (1d)$$

donde \vec{E} es el campo eléctrico, \vec{B} el campo magnético, \vec{J}_{tot} es la densidad de total corriente, ρ_{tot} es la densidad de carga total, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío y μ_0 la permeabilidad magnética del vacío. Existen dos tipos de plasmones, los plasmones de bulto y los de superficie [8]. La frecuencia plasmónica de bulto del aluminio está dada por [8]

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}}, \quad (2)$$

donde n es la densidad de electrones, e es la carga del electrón, m es su masa efectiva y ω_p es la frecuencia de plasma. La parte real de la función dieléctrica es positiva para valores mayores a la frecuencia de plasma ω_p . En el modelo de Drude, si se desprecia el amortiguamiento γ de los electrones, los plasmones de superficie en el aluminio ocurren en el intervalo $0 < \omega < \omega_s$, donde $\omega_s = \omega_p/\sqrt{2}$, es la frecuencia de plasma de superficie. Para el aluminio, la energía asociada a la frecuencia plasmónica de superficie es $\hbar\omega_p/\sqrt{2} = 9.29$ eV, con $\hbar\omega_p = 13.14$ eV [10]. Cuando una onda electromagnética tiene una frecuencia $\omega < \omega_s$ no puede propagarse por el material y se genera una onda evanescente dentro del mismo. Por otra parte, si $\omega > \omega_s$ la onda electromagnética se propaga a través del material [9]. Dentro de los plasmones de superficie existen los localizados en nanopartículas y los que se propagan en interfaces. Cuando una onda electromagnética interactúa con una nanopartícula metálica, polariza el gas de electrones y, en conjunto con la fuerza restauradora (debida a los iones en reposo) y la geometría de la nanopartícula, se tienen frecuencias de resonancia donde los electrones perturbados se mueven de manera colectiva. Las propiedades ópticas de las nanopartículas están determinadas por las frecuencias de resonancia también conocidas como *resonancias plasmónicas de superficie localizadas*, ver Fig. 1.

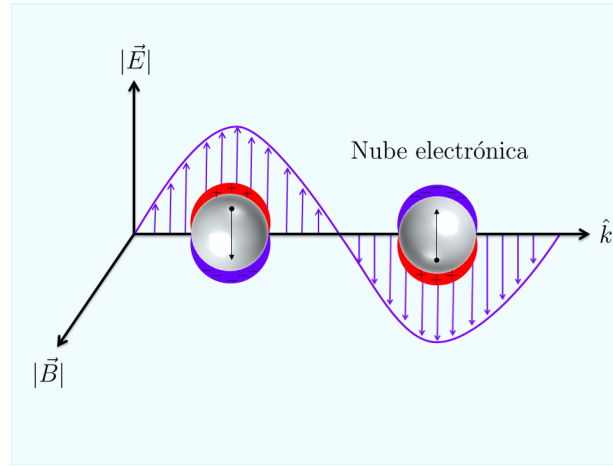


Fig. 1: Resonancia plasmónica de superficie localizada. Cuando una onda electromagnética ilumina nanopartículas metálicas de aluminio, se induce un campo eléctrico dentro de la nanopartícula. El esquema muestra la intensidad de campo eléctrico que desplaza la nube electrónica. La fuerza restauradora debida al desplazamiento de carga provoca que la nube electrónica oscile a la frecuencia del plasma.

Para el sistema monocapa de interés, las dimensiones de las nanopartículas de aluminio son del orden o menor a la longitud de onda de la luz incidente. En consecuencia, los modos plasmónicos de las nanopartículas de aluminio que conforman la monocapa están localizados en la superficie de la nanopartícula.

Sistema de interés

El sistema de interés consiste en una monocapa de nanopartículas esféricas de aluminio embebidas en aire y localizadas al azar sobre un sustrato de cuarzo (SiO_2). El sistema se ilumina en configuración externa, a incidencia normal, en un intervalo $\Delta\lambda = (14 - 32,000)$ nm, ver Fig. 2.

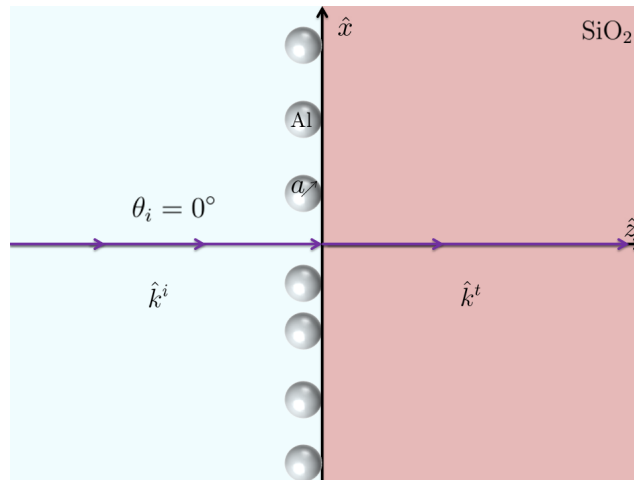


Fig. 2: Esquema del sistema de interés. Una monocapa de nanopartículas esféricas de aluminio con radio a , embebidas en vacío y localizadas al azar sobre un sustrato de cuarzo (SiO_2), se ilumina en configuración externa, a incidencia normal, en un intervalo $\Delta\lambda = (14 - 32,000)$ nm.

Las nanopartículas tienen una distribución de tamaño en el intervalo $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ nm, con un máximo alrededor de $a = 3.2$ nm. La fracción de cubierta corresponde al área proyectada por todas las esferas sobre el área de la placa. El sistema monocapa fabricado por el Dr. Rodríguez-Gómez tiene una separación mínima promedio $\langle D_{min} \rangle$ entre las nanopartículas de 1 nm. La distancia mínima promedio $\langle D_{min} \rangle$ y la fracción de cubierta Θ de la monocapa se relacionan mediante la expresión $\Theta = \pi a^2 / (2a + \langle D_{min} \rangle)^2$, ver Fig. 3.

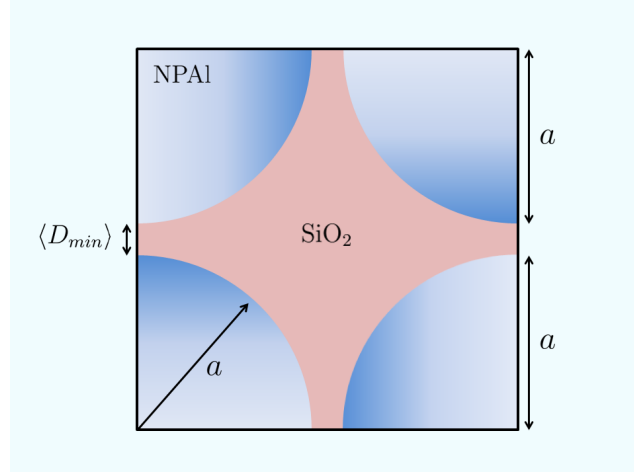


Fig. 3: La fracción de cubierta Θ de la monocapa se relaciona con el radio de la partícula a y la distancia mínima entre partículas promedio $\langle D_{min} \rangle$, mediante la expresión $\Theta = \pi a^2 / (2a + \langle D_{min} \rangle)^2$.

Para la distribución de radios Δa , la fracción de cubierta está contenida en el intervalo $\Delta \Theta = (0.47 - 0.64)$. Para partículas de radio $a = 3.2$ nm con una separación $\langle D_{min} \rangle = 1$ nm, se tiene que $\Theta = 0.58$.

El objetivo general de esta tesis es comparar la predicción de la absorbancia con los resultados del sistema experimental descrito. Para calcular la absorbancia del sistema se utilizó el modelo dipolar, que modela la capa de nanopartículas en el sistema de tres medios, y fue desarrollado específicamente para sistemas bidimensionales con base en una aproximación de medio efectivo [11]. Dicho modelo considera un tensor dieléctrico que da cuenta del carácter anisótropo del sistema monocapa. El modelo dipolar considera a las nanopartículas que conforman la monocapa como dipolos eléctricos puntuales polarizables, de modo que al ser iluminados por una onda electromagnética externa, el campo que interactúa con un dipolo es la suma del campo externo más el producido por todos los demás dipolos en la monocapa. El modelo dipolar también considera los dipolos inducidos en el sustrato (dipolos imagen).

La tesis se divide en cuatro partes: Teoría (capítulo 1), Características de las muestras previamente fabricadas (capítulo 2), Resultados (capítulo 3) y Conclusiones (capítulo 3.4). En el capítulo 1, partiendo de las ecuaciones de Maxwell, se estudia la interacción de una onda electromagnética plana y armónica en el tiempo que incide en una superficie plana, derivando así las leyes de reflexión y refracción de la luz (sección 1.1) que junto con las condiciones de frontera apropiadas, resulta en las expresiones para los coeficientes de reflexión y transmisión de luz obtenidos con la formulación de Fresnel (subsección 1.1.1).

En la sección 1.2 se analizan las propiedades ópticas de un sistema multicapa cuando una onda

electromagnética plana y armónica en el tiempo incide sobre un medio estratificado que, junto con el formalismo de matriz de transferencia (subsección 1.2.1) resulta en las expresiones de los coeficientes de reflexión y transmisión para un medio estratificado (subsección 1.2.2). Para modelar la respuesta de la monocapa, en la sección 1.3 se utiliza el modelo dipolar para describir la respuesta electromagnética de un conjunto de partículas desordenadas, en arreglo 2D, embebidas en un medio dieléctrico e iluminadas en configuración de incidencia externa (subsección 1.3.1).

En la sección 1.4 se estudia la función dieléctrica del aluminio así como la metodología para determinar los parámetros del modelo de Drude-Sommerfeld, subsección 1.4.1 (modelo de gas de electrones) así como la corrección por tamaño para partículas de aluminio con dimensiones menores de 10 nm, subsección 1.4.2. Con las expresiones para la función dieléctrica del aluminio corregida por tamaño y las expresiones de los coeficientes de reflexión y transmisión para un medio estratificado, en la sección 1.5 se derivan las expresiones para la reflectancia, transmitancia, absorción y absorbancia de un medio estratificado conformado por 3 medios.

En la sección 1.6 se estudia la solución de Mie que resuelve las ecuaciones de Maxwell para el esparcimiento de la radiación electromagnética por una partícula esférica, con lo cual se derivan soluciones para los campos eléctrico y magnético, tanto dentro como fuera de la esfera, en términos de una base esférica cuyos coeficientes de expansión son conocidos como coeficientes de Mie. Para entender la respuesta de la monocapa cuando una onda plana armónica en el tiempo incide en el sistema, en la sección 1.7 se derivan los elementos básicos para los métodos computacionales BEM, sección 1.7.1 y MNPBEM, sección 1.7.3. Con el método MNPBEM se describe tanto la respuesta electromagnética de una nanopartícula soportada sobre cuarzo en función del radio, así como la de un dímero de nanopartículas soportado sobre cuarzo en función de la distancia de separación.

En el capítulo 2 se analizan las características de las muestras previamente fabricadas en el Instituto de Física de la UNAM por el Dr. Rodríguez-Gómez, fabricadas mediante el método de pulverización catódica.

En el capítulo 3 se muestran los resultados de los coeficientes de absorción, extinción y esparcimiento para una nanopartícula de aluminio aislada (subsección 3.1) en función del radio de la nanopartícula en aire y soportada sobre un sustrato de cuarzo, subsección 3.1.1. Asimismo, en la sección 3.2, se presentan tanto los resultados de un dímero de nanopartículas de aluminio aislado, como los resultados de un dímero de nanopartículas de aluminio sobre un sustrato de cuarzo, subsección 3.2.1. En la sección 3.3, se muestran los resultados de reflectancia y transmitancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio en función de los parámetros relevantes del problema, con los cuales es posible derivar expresiones para la absorción y absorbancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio, también en función de los parámetros relevantes del problema, sección 3.4. Por último, se presentan las conclusiones con base en los resultados obtenidos en el capítulo 3, con lo cual es posible describir la respuesta del sistema experimental para entender los mecanismos que generan el máximo de absorbancia en los datos experimentales.

1.1. Leyes de reflexión y refracción de la luz

Cuando una onda electromagnética incide en una interfaz plana entre dos medios homogéneos e isotropos¹ con diferentes propiedades ópticas, se divide en dos ondas: una onda que se propaga en el medio de transmisión (medio 2) y una onda reflejada que se propaga hacia el medio de incidencia (medio 1), ver Fig. 1.1. Dado que cualquier onda electromagnética se puede representar en términos de ondas planas [12] que tienen la forma $\vec{A}(\vec{r}, t) = A_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$, donde A_0 es la amplitud compleja de la onda, \vec{k} es el vector de propagación, \vec{r} es un punto cualquiera del espacio, ω es la frecuencia angular y t es el tiempo, a continuación se derivarán las amplitudes para las ondas tanto reflejada como transmitida y sus direcciones de propagación.

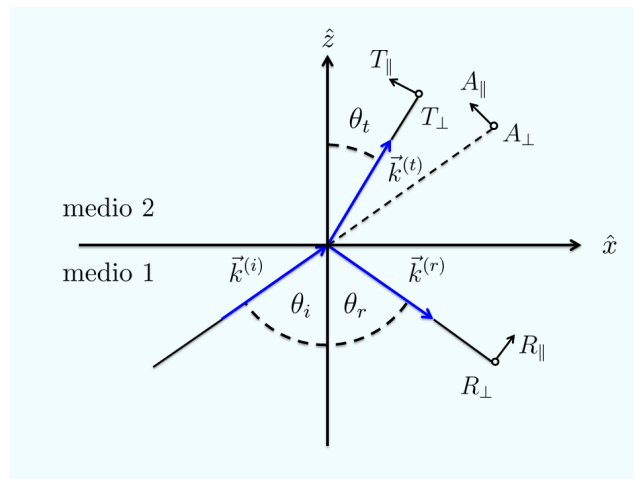


Fig. 1.1: Reflexión y refracción de una onda plana electromagnética en una interfaz plana entre dos medios homogéneos e isotropos.

En la Fig. 1.1 se muestra una onda plana que se propaga en la dirección dada por el vector de propagación $\vec{k}^{(i)}$, así como las ondas reflejada y transmitida, en direcciones dadas por $\vec{k}^{(r)}$ y $\vec{k}^{(t)}$,

¹Un medio homogéneo e isotropo es aquel cuyas características no varían de un punto a otro y sus propiedades son las mismas en cualquier dirección, respectivamente.

respectivamente (los sufijos i , r y t corresponden a las ondas incidente, reflejada y transmitida, respectivamente). Si $F(t) = e^{-i\omega t}$ representa el comportamiento temporal de la onda plana en un punto dado del espacio, el comportamiento en cualquier otro punto, donde \vec{r} es el vector relativo entre dichos puntos y v es la velocidad de la onda en el medio, está dado por $\vec{F}(t - (\vec{r} \cdot \vec{k})/v)$. En la interfaz entre el medio 1 y el medio 2 (ver Fig. 1.1), la variación temporal de las ondas reflejada y transmitida será la misma que la onda incidente [13]. Por lo tanto, igualando los argumentos de las tres ondas planas (incidente, reflejada y transmitida) en un punto \vec{r} en la interfaz $z = 0$, se obtiene que

$$t - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{k}^{(i)})}{v_1} = t - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{k}^{(r)})}{v_1} = t - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{k}^{(t)})}{v_2}, \quad (1.1)$$

donde v_1 es la velocidad de propagación de las ondas incidente y reflejada en el medio 1 y v_2 es la velocidad de propagación de la onda transmitida en el medio 2. De manera explícita, con $\vec{r} = (x, y, 0)$ sobre la interfaz y un tiempo t , la Ec. (1.1) se reescribe como

$$\frac{xk_x^{(i)} + yk_y^{(i)}}{v_1} = \frac{xk_x^{(r)} + yk_y^{(r)}}{v_1} = \frac{xk_x^{(t)} + yk_y^{(t)}}{v_2}, \quad (1.2)$$

donde $k_x^{(i,r,t)}$ y $k_y^{(i,r,t)}$ son las componentes x y y , respectivamente, del vector de propagación \vec{k} correspondiente. La Ec. (1.2) debe ser válida para todo valor de x y y en la interfaz, por lo tanto

$$\frac{k_x^{(i)}}{v_1} = \frac{k_x^{(r)}}{v_1} = \frac{k_x^{(t)}}{v_2} \quad \text{y} \quad \frac{k_y^{(i)}}{v_1} = \frac{k_y^{(r)}}{v_1} = \frac{k_y^{(t)}}{v_2}. \quad (1.3)$$

El plano definido por el vector $\vec{k}^{(i)}$ y la normal a la interfaz (eje \hat{z}) se define como *plano de incidencia* (plano XZ en la Fig. 1.1). La Ec. (1.3) muestra que tanto $\vec{k}^{(r)}$ como $\vec{k}^{(t)}$ están en el plano de incidencia. Denotando por θ_i , θ_r y θ_t a los ángulos que los vectores $\vec{k}^{(i)}$, $\vec{k}^{(r)}$ y $\vec{k}^{(t)}$ forman respectivamente con el eje \hat{z} (dirección normal a la interfaz) y analizando las componentes del vector de propagación, se tiene que

$$k_x^{(i)} = |\vec{k}^{(i)}| \text{sen } \theta_i, \quad k_y^{(i)} = 0, \quad k_z^{(i)} = |\vec{k}^{(i)}| \text{cos } \theta_i, \quad (1.4a)$$

$$k_x^{(r)} = |\vec{k}^{(r)}| \text{sen } \theta_r, \quad k_y^{(r)} = 0, \quad k_z^{(r)} = |\vec{k}^{(r)}| \text{cos } \theta_r, \quad (1.4b)$$

$$k_x^{(t)} = |\vec{k}^{(t)}| \text{sen } \theta_t, \quad k_y^{(t)} = 0, \quad k_z^{(t)} = |\vec{k}^{(t)}| \text{cos } \theta_t. \quad (1.4c)$$

La componente z del vector \vec{k} es positiva para ondas propagándose del medio 1 al medio 2, mientras que es negativa para la onda reflejada, que se propaga del medio 2 hacia el medio 1. Sustituyendo los valores de $k_x^{(i)}$, $k_x^{(r)}$ y $k_x^{(t)}$, Ecs. (1.4a), (1.4b) y (1.4c), respectivamente, en la primer igualdad de la Ec. (1.3), se obtiene

$$\frac{|\vec{k}^{(i)}| \text{sen } \theta_i}{v_1} = \frac{|\vec{k}^{(r)}| \text{sen } \theta_r}{v_1} = \frac{|\vec{k}^{(t)}| \text{sen } \theta_t}{v_2}. \quad (1.5)$$

De la primer igualdad en la Ec. (1.5), se tiene que

$$\text{sen } \theta_i = \text{sen } \theta_r, \quad (1.6)$$

por lo que se obtiene que

$$\theta_i = \theta_r. \quad (1.7)$$

La Ec. (1.7), junto con el hecho de que la onda reflejada está en el plano de incidencia, constituyen lo que se conoce como *ley de reflexión* [14].

Reescribiendo la segunda igualdad de la Ec. (1.5), la cual relaciona el seno de los ángulos incidente θ_i y transmitido θ_t (ver Fig 1.1), con las velocidades de propagación en el medio 1 y en el medio 2, se tiene que

$$v_2 \sen \theta_i = v_1 \sen \theta_t, \quad (1.8)$$

entonces

$$\frac{\sen \theta_i}{\sen \theta_t} = \frac{v_1}{v_2}. \quad (1.9)$$

La relación entre el índice de refracción² n y la velocidad de propagación v de la onda en un medio es $v = c/n$, donde c es la velocidad de la luz, y está relacionado con la función dieléctrica³ ϵ y permeabilidad magnética⁴ μ del material como $n = \sqrt{\epsilon\mu}$, entonces

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{\sqrt{\epsilon_2\mu_2}}{\sqrt{\epsilon_1\mu_1}}. \quad (1.10)$$

De las Ecs. (1.9) y (1.10) se tiene que

$$\frac{\sen \theta_i}{\sen \theta_t} = \frac{n_2}{n_1}. \quad (1.11)$$

La Ec. (1.11), junto con el hecho que la onda transmitida está en el plano de incidencia, constituyen la *ley de refracción* (también conocida como ley de Snell) [14].

Cuando el medio 2 es ópticamente más denso que el medio 1, esto es que $n_2 > n_1$, entonces $n_2/n_1 > 1$. De la Ec. (1.11), se tiene que

$$\sen \theta_t = \frac{1}{n_2/n_1} \sen \theta_i < \sen \theta_i, \quad (1.12)$$

es decir que $\theta_t < \theta_i$, de tal forma que existe un ángulo θ_t real para cada θ_i . Por otra parte, si el segundo medio es ópticamente menos denso que el primer medio (es decir que $n_2/n_1 < 1$), se tiene que

$$\sen \theta_t = \frac{1}{n_2/n_1} \sen \theta_i > \sen \theta_i, \quad (1.13)$$

por tanto $\theta_t > \theta_i$. Esto significa que cuando θ_i aumenta, θ_t llega a $\pi/2$ radianes antes que θ_i .

²El índice de refracción es la razón entre la velocidad de una onda electromagnética c y la velocidad promedio v de la onda en el medio material, definido como $n \equiv c/v$.

³La función dieléctrica en el vacío tiene el valor de $\epsilon_0 = 8.8542 \times 10^{-12} \text{C}^2/\text{Nm}^2$ [14]. Para un medio material se define $\epsilon \equiv \epsilon_0(1 + \chi_e)$, donde χ_e es la susceptibilidad eléctrica adimensional del material. En el vacío, donde no hay material que polarizar, χ_e es cero. El valor de χ_e depende de la estructura microscópica del material.

⁴La permeabilidad magnética en el vacío tiene el valor $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{N/A}^2$ [14]. Para un medio material se define $\mu \equiv \mu_0(1 + \chi_m)$, donde χ_m es la susceptibilidad magnética adimensional. En el vacío donde no hay material que magnetizar, χ_m es cero. El valor de χ_m depende de la estructura microscópica del material.

Acotando el valor de $1 \geq \sin \theta_t$ en la Ec. (1.13), los únicos valores de $\sin \theta_i$ que satisfacen que $\sin \theta_i / (n_2/n_1) \geq 1$ son $\sin \theta_i \leq n_2/n_1$. Para valores θ_i que satisfacen $\sin \theta_i > n_2/n_1$ ocurre el fenómeno de reflexión total interna [14].

1.1.1. Formulación de Fresnel

Asumiendo que los vectores de campo eléctrico de las ondas incidente, reflejada y transmitida en la interfaz entre el medio 1 y el medio 2, ver Fig. 1.1, son ondas planas de la forma

$$\vec{E}^{(i)}(\vec{r}, t) = A_0 e^{i(\vec{k}^{(i)} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (1.14a)$$

$$\vec{E}^{(r)}(\vec{r}, t) = R_0 e^{i(\vec{k}^{(r)} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (1.14b)$$

$$\vec{E}^{(t)}(\vec{r}, t) = T_0 e^{i(\vec{k}^{(t)} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (1.14c)$$

donde A_0 , R_0 , T_0 , y $\vec{k}^{(i)}$, $\vec{k}^{(r)}$, $\vec{k}^{(t)}$ son las amplitudes complejas y los vectores de onda de la onda incidente, reflejada y transmitida, respectivamente, \vec{r} es un punto cualquiera del espacio, ω es la frecuencia angular y t es el tiempo, a continuación se derivan las relaciones entre las amplitudes de las ondas transmitida y reflejada en función de la amplitud incidente y los ángulos de incidencia θ_i y transmitido θ_t , conocidas como *ecuaciones de Fresnel*.

Considerando el vector de campo eléctrico incidente, Ec. (1.14a), y su fase dada por

$$\tau_i = (\vec{k}^{(i)} \cdot \vec{r} - \omega t) = \omega \left(\frac{x \sin \theta_i + z \cos \theta_i}{v_1} - t \right), \quad (1.15)$$

se descompone el vector de campo eléctrico incidente en su componente paralela (subíndice \parallel) y perpendicular (subíndice \perp) al plano de incidencia, ver Fig. 1.1 (las componentes perpendiculares salen de la página). De esta forma, las componentes del vector de campo eléctrico incidente son

$$E_x^{(i)} = -A_{\parallel} \cos \theta_i e^{-i\tau_i}, \quad E_y^{(i)} = A_{\perp} e^{-i\tau_i}, \quad E_z^{(i)} = A_{\parallel} \sin \theta_i e^{-i\tau_i}. \quad (1.16)$$

Las componentes del campo magnético se obtienen a partir de la ley de Faraday [14]

$$\vec{H} = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \hat{k} \times \vec{E}, \quad (1.17)$$

donde \vec{H} es el vector H, ϵ y μ son la función dieléctrica y permeabilidad magnética, respectivamente, del medio donde se propaga la onda, \hat{k} es el vector de onda unitario que apunta en la dirección de propagación. Asumiendo que el medio 1 y el medio 2, ver Fig. 1.1, son materiales no magnéticos, homogéneos e isotrópicos, entonces las permeabilidades magnéticas del medio 1 y medio 2 son $\mu_1 = \mu_2 = 1$. En este caso la Ec. (1.17) se reescribe como

$$\vec{H} = \sqrt{\epsilon} \hat{k} \times \vec{E}, \quad (1.18)$$

que en forma de determinante tiene la siguiente forma para el medio 1

$$\vec{H} = \sqrt{\epsilon_1} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ k_x & 0 & k_z \\ E_x^{(i)} & E_y^{(i)} & E_z^{(i)} \end{vmatrix},$$

entonces

$$\vec{H} = (-E_y^{(i)} k_z \sqrt{\epsilon_1}) \hat{x} + (k_z E_x^{(i)} \sqrt{\epsilon_1} - k_x E_z^{(i)} \sqrt{\epsilon_1}) \hat{y} + (k_x E_y^{(i)} \sqrt{\epsilon_1}) \hat{z}. \quad (1.19)$$

Sustituyendo los valores de las componentes $E_x^{(i)}$, $E_y^{(i)}$ y $E_z^{(i)}$ de la Ec. (1.16) en la Ec. (1.19) se tiene

$$\vec{H} = (-A_{\perp} \cos \theta_i \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_i}) \hat{x} + (-A_{\parallel} \cos^2 \theta_i e^{-i\tau_i} \sqrt{\epsilon_1} - A_{\parallel} \sin^2 \theta_i e^{-i\tau_i} \sqrt{\epsilon_1}) \hat{y} + (\sin \theta_i A_{\perp} e^{-i\tau_i} \sqrt{\epsilon_1}) \hat{z}.$$

Por lo tanto,

$$H_x^{(i)} = -A_{\perp} \cos \theta_i \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_i}, \quad H_y^{(i)} = -A_{\parallel} \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_i}, \quad H_z^{(i)} = A_{\perp} \sin \theta_i \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_i}. \quad (1.20)$$

De forma análoga, si T_0 y R_0 son las amplitudes complejas de las ondas transmitida y reflejada, respectivamente, ver Ecs. (1.14b) y (1.14c), las componentes correspondientes a los campos eléctrico y magnético transmitidos son

$$E_x^{(t)} = -T_{\parallel} \cos \theta_t e^{-i\tau_t}, \quad E_y^{(t)} = T_{\perp} e^{-i\tau_t}, \quad E_z^{(t)} = T_{\parallel} \sin \theta_t e^{-i\tau_t}, \quad (1.21)$$

$$H_x^{(t)} = -T_{\perp} \cos \theta_t \sqrt{\epsilon_2} e^{-i\tau_t}, \quad H_y^{(t)} = -T_{\parallel} \sqrt{\epsilon_2} e^{-i\tau_t}, \quad H_z^{(t)} = T_{\perp} \sin \theta_t \sqrt{\epsilon_2} e^{-i\tau_t}, \quad (1.22)$$

con

$$\tau_t = (\vec{k}^{(t)} \cdot \vec{r} - \omega t) = \omega \left(\frac{x \sin \theta_t + z \cos \theta_t}{v_2} - t \right), \quad (1.23)$$

y las componentes correspondientes a los campos eléctrico y magnético reflejados son

$$E_x^{(r)} = -R_{\parallel} \cos \theta_r e^{-i\tau_r}, \quad E_y^{(r)} = R_{\perp} e^{-i\tau_r}, \quad E_z^{(r)} = R_{\parallel} \sin \theta_r e^{-i\tau_r}, \quad (1.24)$$

$$H_x^{(r)} = -R_{\perp} \cos \theta_r \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_r}, \quad H_y^{(r)} = -R_{\parallel} \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_r}, \quad H_z^{(r)} = R_{\perp} \sin \theta_r \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_r}, \quad (1.25)$$

con

$$\tau_r = (\vec{k}^{(r)} \cdot \vec{r} - \omega t) = \omega \left(\frac{x \sin \theta_r + z \cos \theta_r}{v_1} - t \right). \quad (1.26)$$

Las componentes tangenciales de los vectores de campo eléctrico \hat{E} y campo \vec{H} en la interfaz entre ambos medios (eje \hat{x} Fig. 1.1) son continuas, esto es

$$\vec{E}_{\parallel}^1 - \vec{E}_{\parallel}^2 = 0, \quad (1.27a)$$

$$\vec{H}_{\parallel}^1 - \vec{H}_{\parallel}^2 = 0, \quad (1.27b)$$

donde $\vec{E}_{\parallel}^{(1,2)}$ es la componente tangencial del campo eléctrico en el medio 1 y medio 2, respectivamente, y $\vec{H}_{\parallel}^{(1,2)}$ es la componente tangencial del campo \vec{H} en el medio 1 y medio 2, respectivamente. La onda incidente y reflejada se propagan en el medio 1, mientras que la onda transmitida se propaga en el medio 2. Las componentes tangenciales de los campos eléctrico y magnético en la

interfaz entre el medio 1 y el medio 2 [Ecs. (1.27a) y (1.27b)] se reescriben de la forma

$$E_x^{(i)} + E_x^{(r)} = E_x^{(t)}, \quad E_y^{(i)} + E_y^{(r)} = E_y^{(t)}, \quad (1.28a)$$

$$H_x^{(i)} + H_x^{(r)} = H_x^{(t)}, \quad H_y^{(i)} + H_y^{(r)} = H_y^{(t)}. \quad (1.28b)$$

Sustituyendo las componentes del campo eléctrico dadas en las Ecs. (1.16), (1.21) y (1.24) en la Ec. (1.28a), así como las componentes del campo magnético dadas en las Ecs. (1.20), (1.22) y (1.25) en la Ec. (1.28b), y como $\cos \theta_r = \cos(\pi - \theta_i) = -\cos \theta_i$, se tiene, de la primera igualdad en la Ec. (1.28a),

$$\begin{aligned} E_x^{(i)} + E_x^{(r)} &= E_x^{(t)}, \\ -A_{\parallel} \cos \theta_i e^{-i\tau_i} - R_{\parallel} \cos \theta_r e^{-i\tau_r} &= -T_{\parallel} \cos \theta_t e^{-i\tau_t}, \\ A_{\parallel} \cos \theta_i - R_{\parallel} \cos \theta_i &= T_{\parallel} \cos \theta_t, \\ \cos \theta_i (A_{\parallel} - R_{\parallel}) &= \cos \theta_t T_{\parallel}. \end{aligned}$$

De la segunda igualdad en la Ec. (1.28a),

$$\begin{aligned} E_y^{(i)} + E_y^{(r)} &= E_y^{(t)}, \\ A_{\perp} e^{-i\tau_i} + R_{\perp} e^{-i\tau_r} &= T_{\perp} e^{-i\tau_t}, \\ A_{\perp} + R_{\perp} &= T_{\perp}. \end{aligned}$$

De la primera igualdad en la Ec. (1.28b),

$$\begin{aligned} H_x^{(i)} + H_x^{(r)} &= H_x^{(t)}, \\ -A_{\perp} \cos \theta_i \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_i} + -R_{\perp} \cos \theta_r \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_r} &= -T_{\perp} \cos \theta_t \sqrt{\epsilon_2} e^{-i\tau_t}, \\ A_{\perp} \cos \theta_i \sqrt{\epsilon_1} + -R_{\perp} \cos \theta_i \sqrt{\epsilon_1} &= T_{\perp} \cos \theta_t \sqrt{\epsilon_2}, \\ \cos \theta_i \sqrt{\epsilon_1} (A_{\perp} - R_{\perp}) &= T_{\perp} \cos \theta_t \sqrt{\epsilon_2}. \end{aligned}$$

De la segunda igualdad en la Ec. (1.28b),

$$\begin{aligned} H_y^{(i)} + H_y^{(r)} &= H_y^{(t)}, \\ -A_{\parallel} \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_i} + -R_{\parallel} \sqrt{\epsilon_1} e^{-i\tau_r} &= -T_{\parallel} \sqrt{\epsilon_2} e^{-i\tau_t}, \\ (A_{\parallel} + R_{\parallel}) \sqrt{\epsilon_1} &= T_{\parallel} \sqrt{\epsilon_2}. \end{aligned}$$

De las Ecs. (1.28) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\cos \theta_i (A_{\parallel} - R_{\parallel}) = \cos \theta_t T_{\parallel}, \quad (1.29a)$$

$$A_{\perp} + R_{\perp} = T_{\perp}, \quad (1.29b)$$

$$\sqrt{\epsilon_1} \cos \theta_i (A_{\perp} - R_{\perp}) = T_{\perp} \sqrt{\epsilon_2} \cos \theta_t, \quad (1.29c)$$

$$\sqrt{\epsilon_1} (A_{\parallel} + R_{\parallel}) = T_{\parallel} \sqrt{\epsilon_2}. \quad (1.29d)$$

Las Ecs. (1.29a) - (1.29d) se dividen en dos grupos: el primer grupo corresponde a las componentes paralelas al plano de incidencia (*polarización p*) [Ecs. (1.29a) y (1.29d)], mientras que el segundo grupo corresponde a las componentes perpendiculares al plano de incidencia (*polarización s*) [Ecs. (1.29b) y (1.29c)]. Despejando T y R en términos de A y considerando que $n_1 = \sqrt{\epsilon_1}$ y $n_2 = \sqrt{\epsilon_2}$, se obtiene que

$$T_{\parallel} = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_2 \cos \theta_i + n_1 \cos \theta_t} A_{\parallel}, \quad (1.30a)$$

$$T_{\perp} = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} A_{\perp}, \quad (1.30b)$$

$$R_{\parallel} = \frac{n_2 \cos \theta_i - n_1 \cos \theta_t}{n_2 \cos \theta_i + n_1 \cos \theta_t} A_{\parallel}, \quad (1.31a)$$

$$R_{\perp} = \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} A_{\perp}. \quad (1.31b)$$

Utilizando la ley de refracción [Ec. (1.11)], las Ecs. (1.30) y (1.31) se reescriben de la forma

$$T_{\parallel} = \frac{2 \operatorname{sen} \theta_t \cos \theta_i}{\operatorname{sen}(\theta_i + \theta_t) \cos(\theta_i - \theta_t)} A_{\parallel}, \quad (1.32a)$$

$$T_{\perp} = \frac{2 \operatorname{sen} \theta_t \cos \theta_i}{\operatorname{sen}(\theta_i + \theta_t)} A_{\perp}, \quad (1.32b)$$

$$R_{\parallel} = \frac{\tan(\theta_i - \theta_t)}{\tan(\theta_i + \theta_t)} A_{\parallel}, \quad (1.32c)$$

$$R_{\perp} = -\frac{\operatorname{sen}(\theta_i - \theta_t)}{\operatorname{sen}(\theta_i + \theta_t)} A_{\perp}. \quad (1.32d)$$

Las Ecs. (1.32) son llamadas *ecuaciones de Fresnel*, derivadas en 1823 por Fresnel, con base a su teoría elástica de la luz [13]. Dado que θ_i y θ_t son cantidades reales, los factores trigonométricos en el lado derecho de las Ecs. (1.32) también son reales. Consecuentemente, las fases de cada componente de las ondas reflejada y transmitida son iguales a la fase de la onda incidente, o bien difieren por π . Debido a que T_{\parallel} y T_{\perp} tienen el mismo signo que A_{\parallel} y A_{\perp} , respectivamente, la fase de la onda transmitida es igual a la fase de la onda incidente. En el caso de la onda reflejada, la fase depende de las magnitudes relativas de θ_i y θ_t . En el caso que $\epsilon_2 > \epsilon_1$, entonces $\theta_t < \theta_i$, y de acuerdo a la Ec. (1.32d) los signos de R_{\perp} y A_{\perp} son diferentes, entonces la fase difiere por π . Bajo estas mismas circunstancias $\tan(\theta_i + \theta_t) > \pi/2$, y de acuerdo a la Ec. (1.32c) las fases de R_{\parallel} y A_{\parallel} difieren por π . Analizando el cociente de $E_y^{(r)}/E_y^{(i)}$ y $E_x^{(r)}/E_x^{(i)}$ en el plano $z = 0$ se tiene que

$$\frac{E_y^{(r)}}{E_y^{(i)}} = \frac{R_{\perp}}{A_{\perp}}, \quad \frac{E_x^{(r)}}{E_x^{(i)}} = -\frac{R_{\parallel}}{A_{\parallel}}. \quad (1.33)$$

De las Ecs. (1.33), la fase entre la componente $E_y^{(r)}$ y $E_y^{(i)}$ tiene un valor de π , mientras que las componentes $E_x^{(r)}$ y $E_x^{(i)}$ están en fase.

Para incidencia normal, $\theta_i = 0$, y consecuentemente $\theta_t = 0$, las Ecs. (1.30) y (1.31) se simplifican como

$$T_{\parallel} = \frac{2}{n+1} A_{\parallel}, \quad (1.34a)$$

$$T_{\perp} = \frac{2}{n+1} A_{\perp}, \quad (1.34b)$$

$$R_{\parallel} = \frac{n-1}{n+1} A_{\parallel}, \quad (1.35a)$$

$$R_{\perp} = -\frac{n-1}{n+1} A_{\perp}, \quad (1.35b)$$

donde $n = n_1/n_2$.

1.2. Propagación de ondas en medios estratificados

Un medio cuyas propiedades ópticas son constantes a través de distintos planos perpendiculares a una posición fija en el espacio es llamado un *medio estratificado* [13].

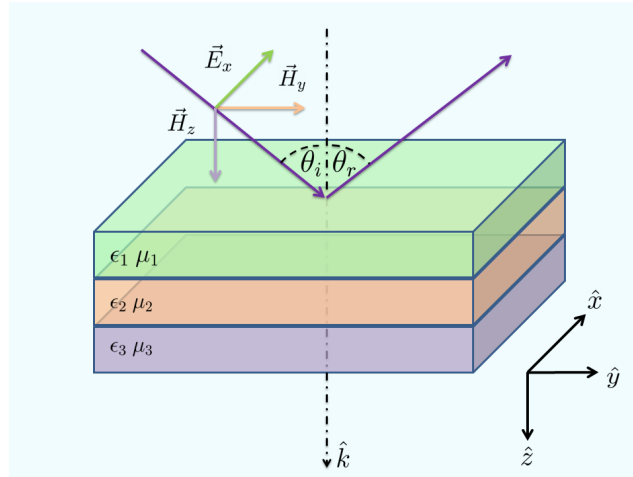


Fig. 1.2: Medio estratificado. Una onda electromagnética plana y armónica en el tiempo se propaga en la dirección z , e incide sobre un medio estratificado caracterizado por tres medios (a modo de ejemplo porque pueden ser n medios) con permitividades eléctricas ϵ_i , y permeabilidades magnéticas μ_i con $i = 1, 2, 3$. Configuración de incidencia externa.

En la Fig. 1.2 se esquematiza una onda electromagnética plana y armónica en el tiempo que incide sobre un medio estratificado. La respuesta óptica de este medio se expresa por medio de las funciones ϵ y μ , donde ϵ es la función dieléctrica y μ es la permeabilidad magnética del material. A partir de las ecuaciones de Maxwell se deducen expresiones que relacionan el campo eléctrico incidente con los campos eléctricos en la interfaz entre cada uno de los medios. Este formalismo se conoce como *método de matriz de transferencia* [13].

1.2.1. Método de matriz de transferencia

Cuando una onda electromagnética está polarizada linealmente e incide sobre una interfaz plana entre dos medios con el vector de campo eléctrico paralelo al plano de incidencia (plano YZ), ver Fig. 1.2, entonces se trata de una onda eléctrica transversal (TE) o bien polarización s , y cuando la onda electromagnética está linealmente polarizada con el vector de campo magnético perpendicular al plano de incidencia (plano YZ), ver Fig. 1.2, entonces se trata de una onda magnética transversal (TM) o bien polarización p . Cualquier onda electromagnética polarizada arbitrariamente puede descomponerse en su componente de polarización s y polarización p . En la interfaz entre dos medios, las condiciones de frontera son tales que las componentes paralelas y perpendiculares son independientes una de otra, por tanto las ondas con polarización s y polarización p , serán independientes entre ellas. Otra propiedad de las ecuaciones de Maxwell es que al intercambiar el campo \vec{E} por \vec{H} y simultáneamente ϵ por μ , el conjunto de ecuaciones queda invariante. Por tanto será suficiente derivar las ecuaciones diferenciales básicas para estudiar con detalle las ondas con polarización s .

Polarización s

Considerando el plano YZ , con \hat{z} la dirección de estratificación, y una onda electromagnética con polarización s en dirección \hat{x} , que incide en la primer interfaz y se propaga en dirección \hat{z} , las ecuaciones de Maxwell se reducen a seis ecuaciones escalares. En ausencia de cargas y corrientes externas y utilizando las relaciones constitutivas, la ley de Ampère-Maxwell se escribe de la siguiente forma⁵

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = -i\omega \vec{D} = -i\omega \epsilon \vec{E}. \quad (1.36)$$

Dado que $\vec{E} = (E_x, 0, 0)$, entonces la Ec. (1.36) se reescribe como

$$\hat{x} \left[\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right] + \hat{y} \left[\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] + \hat{z} \left[\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right] = \hat{x} \left[-i\omega \epsilon E_x \right], \quad (1.37)$$

obteniéndose el siguiente conjunto de ecuaciones

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} + i\omega \epsilon E_x = 0, \quad (1.38a)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = 0, \quad (1.38b)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = 0. \quad (1.38c)$$

Por otra parte, utilizando la relación constitutiva y la ley de Faraday-Lenz, se tiene que⁵

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = i\omega \vec{B} = i\omega \mu \vec{H}, \quad (1.39)$$

⁵De aquí en adelante y a menos que se especifique lo contrario, tanto la permitividad eléctrica ϵ como la permeabilidad magnética μ son cantidades adimensionales definidas como $\epsilon = \epsilon/\epsilon_0$ y $\mu = \mu/\mu_0$, respectivamente.

y sustituyendo las expresiones del campo eléctrico \vec{E} y \vec{H} , se tiene

$$\hat{x}[0] + \hat{y}\left[\frac{\partial E_x}{\partial z}\right] - \hat{z}\left[\frac{\partial E_x}{\partial y}\right] = i\omega\mu\left[\hat{x}H_x + \hat{y}H_y + \hat{z}H_z\right]. \quad (1.40)$$

De la Ec. (1.40) se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones

$$i\omega\mu H_x = 0, \quad (1.41a)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\omega\mu H_y = 0, \quad (1.41b)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial y} + i\omega\mu H_z = 0. \quad (1.41c)$$

Las Ecs. (1.38) y (1.41) son ecuaciones diferenciales acopladas que contienen información del campo eléctrico y del campo H en el medio estratificado. De las Ecs. (1.41a) - (1.41c) se tiene que H_y , H_z y E_x son funciones de las variables y y z . Si se deriva la Ec. (1.41b) respecto a la variable z , se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\omega\mu(z)H_y\right] &= \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - i\omega\left[\frac{\partial\mu(z)}{\partial z}H_y + \mu(z)\frac{\partial H_y}{\partial z}\right] = 0, \\ \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - i\omega\frac{\partial\mu(z)}{\partial z}H_y - i\omega\mu(z)\frac{\partial H_y}{\partial z} &= 0. \end{aligned}$$

Despejando el término $-\frac{\partial H_y}{\partial z}$ se tiene que

$$-\frac{\partial H_y}{\partial z} = \frac{i}{\omega\mu}\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \frac{d}{dz}\left[\ln\mu(z)\right]H_y. \quad (1.42)$$

Si ahora se deriva la Ec. (1.41c) con respecto a la variable y , se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{\partial E_x}{\partial y} - i\omega\mu(z)H_z\right] = \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + i\omega\mu\frac{\partial H_z}{\partial y} = 0,$$

y despejando $\frac{\partial H_z}{\partial y}$, se obtiene

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = -\frac{1}{i\omega\mu}\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2}. \quad (1.43)$$

Sustituyendo las Ecs. (1.42) y (1.43) en la Ec. (1.38a) se obtiene,

$$-\frac{1}{i\omega\mu}\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{i}{\omega\mu}\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \frac{d}{dz}\left[\ln\mu(z)\right]H_y + i\omega\epsilon E_x = 0. \quad (1.44)$$

De la Ec. (1.41b) se tiene

$$H_y = \frac{1}{i\omega\mu}\frac{\partial E_x}{\partial z},$$

y sustituyendo H_y en la Ec. (1.44), se obtiene

$$\frac{i}{\omega\mu} \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{i}{\omega\mu} \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \frac{d}{dz} [\ln \mu(z)] \left[\frac{i}{\omega\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z} \right] + i\omega\epsilon E_x = 0, \quad (1.45)$$

que, multiplicando la Ec. (1.45) por $-i\omega\mu$, se tiene

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \frac{d}{dz} [\ln \mu(z)] \frac{\partial E_x}{\partial z} + \omega^2 \epsilon \mu E_x = 0. \quad (1.46)$$

Debido a que $n^2 = \epsilon\mu/\epsilon_0\mu_0$ es el índice refracción del medio y $k_0 = \omega/c = 2\pi/\lambda_0$ el número de onda, la Ec. (1.46) se reescribe como

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + n^2 k_0^2 E_x = \frac{d}{dz} [\ln \mu(z)] \frac{\partial E_x}{\partial z}. \quad (1.47)$$

Al resolver la Ec. (1.47) se resuelve también el sistema de Ecs. (1.38) y (1.41). Empleando el método de separación de variables, se propone que el campo eléctrico $E_x(y, z)$ tiene como solución

$$E_x(y, z) = Y(y)U(z), \quad (1.48)$$

en donde Y es una función que únicamente depende de la variable y y U depende únicamente de la variable z . Sustituyendo la expresión de la Ec. (1.48) en la Ec. (1.47) se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 [Y(y)U(z)]}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 [Y(y)U(z)]}{\partial z^2} + n^2 k_0^2 Y(y)U(z) &= \frac{d}{dz} [\ln \mu(z)] \frac{\partial [Y(y)U(z)]}{\partial z}, \\ \frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} U(z) + \frac{\partial^2 U(z)}{\partial z^2} Y(y) + n^2 k_0^2 Y(y)U(z) &= \frac{d}{dz} [\ln \mu(z)] \frac{\partial U(z)}{\partial z} Y(y). \end{aligned} \quad (1.49)$$

Dividiendo la Ec. (1.49) entre $Y(y)U(z)$ se obtiene

$$\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} \frac{1}{Y(y)} + \frac{\partial^2 U(z)}{\partial z^2} \frac{1}{U(z)} + n^2 k_0^2 = \frac{d}{dz} [\ln \mu(z)] \frac{\partial U(z)}{\partial z} \frac{1}{U(z)},$$

obteniéndose finalmente la ecuación

$$\frac{d^2 Y(y)}{dy^2} \frac{1}{Y(y)} = -\frac{d^2 U(z)}{dz^2} \frac{1}{U(z)} - n^2 k_0^2 + \frac{d}{dz} [\ln \mu(z)] \frac{dU(z)}{dz} \frac{1}{U(z)}. \quad (1.50)$$

De la Ec. (1.50), el término de la izquierda sólo depende de y , y el término de la derecha sólo depende de z . La igualdad en la Ec. (1.50) se cumple solamente si cada lado se iguala a una constante $-\kappa^2$, de esta forma se tiene

$$\frac{d^2 Y(y)}{dy^2} = -\kappa^2 Y(y), \quad (1.51)$$

$$\frac{d^2U(z)}{dz^2} + n^2k_0^2U(z) - \frac{d}{dz} \left[\ln \mu(z) \right] \frac{dU(z)}{dz} = \kappa^2U(z), \quad (1.52)$$

donde

$$\kappa^2 = k_0^2\alpha^2. \quad (1.53)$$

donde α es una constante. La solución a la Ec. (1.51) está dada por

$$Y(y) = Ce^{ik_0\alpha y}, \quad (1.54)$$

y en consecuencia la expresión para el campo eléctrico transversal Ec. (1.48), toma la forma

$$E_x(y, z) = U(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}, \quad (1.55)$$

donde $U(z)$ es una función compleja. Las funciones $H_y(y, z)$ y $H_z(y, z)$ están relacionadas con el campo eléctrico de la Ec. (1.55) por las Ecs. (1.41b) y (1.41c). De la Ec. (1.41b) se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial z} - i\omega\mu H_y &= 0, \\ H_y &= \frac{1}{i\omega\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z} = \frac{\partial U(z)}{\partial z} e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} = V(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}, \end{aligned}$$

$$H_y(y, z) = V(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}, \quad (1.56)$$

donde $V(z)$ también es una función compleja. De la Ec. (1.41c) se tiene,

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial y} + i\omega\mu H_z &= 0, \\ H_z &= -\frac{1}{i\omega\mu} \frac{\partial E_x}{\partial y} = -\frac{ik_0\alpha}{i\omega\mu} U(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} = W(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}, \end{aligned}$$

$$H_z(y, z) = W(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}, \quad (1.57)$$

con $W(z)$ otra función compleja. Con las expresiones obtenidas para los campos E_x , H_y , H_z [Ecs. (1.55) - (1.57)], y las Ecs. (1.38a), (1.41b) y (1.41c) que relacionan a los campos E_x , H_y , H_z , se obtiene un nuevo conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas que satisfacen la Ec. (1.50). De la Ec. (1.38a) se obtiene

$$\frac{\partial e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}}{\partial y} W(z) - \frac{\partial V(z)}{\partial z} e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} + i\omega\epsilon U(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} = 0,$$

entonces

$$\left[ik_0\alpha W(z) - \frac{\partial V(z)}{\partial z} + ik_0\epsilon U(z) \right] e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} = 0,$$

y por tanto

$$\frac{\partial V(z)}{\partial z} = ik_0 [\alpha W(z) + \epsilon(z)U(z)]. \quad (1.58)$$

De la Ec. (1.41b), se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial z} - i\omega\mu H_y &= 0, \\ \frac{\partial U(z)}{\partial z} e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} - i\omega\mu V(z) e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} &= 0, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial U(z)}{\partial z} = ik_0\mu(z)V(z). \quad (1.59)$$

De la Ec. (1.41c),

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial y} + i\omega\mu H_z &= 0, \\ \frac{\partial e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}}{\partial y} U(z) + i\omega\mu W(z) e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} &= 0, \\ [ik_0\alpha U(z) + ik_0\mu W(z)] e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} &= 0, \end{aligned}$$

$$\alpha U(z) + \mu(z)W(z) = 0. \quad (1.60)$$

El sistema de Ecs. (1.58) - (1.60) se puede reducir sustituyendo $W(z)$ de la Ec. (1.60) en la Ec. (1.58), obteniéndose

$$\frac{\partial V(z)}{\partial z} = ik_0 \left[-\frac{\alpha^2}{\mu} U(z) + \epsilon U(z) \right] = ik_0 \left[-\frac{\alpha^2}{\mu} + \epsilon \right] U(z),$$

$$\frac{\partial V(z)}{\partial z} = ik_0 \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right] U(z), \quad (1.61)$$

reduciendo así el sistema a dos ecuaciones diferenciales de primer orden, Ecs. (1.59) y (1.61). Para resolverlo, se deriva la Ec. (1.59) respecto a la variable z ,

$$\frac{\partial^2 U(z)}{\partial z^2} = ik_0 \left[\mu(z) \frac{\partial V(z)}{\partial z} + \frac{\partial \mu(z)}{\partial z} V(z) \right], \quad (1.62)$$

y se sustituye el valor $\frac{\partial V(z)}{\partial z}$ de la Ec. (1.61) en la Ec. (1.62),

$$\frac{\partial^2 U(z)}{\partial z^2} = ik_0\mu(z) \left\{ ik_0 \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right] U(z) \right\} + ik_0 \frac{\partial \mu(z)}{\partial z} V(z). \quad (1.63)$$

1. TEORÍA

De la Ec. (1.59) se tiene que $V(z) = \frac{\partial U(z)}{\partial z} \frac{1}{ik_0\mu}$, por lo que sustituyéndolo en la Ec. (1.63) se tiene

$$\frac{\partial^2 U(z)}{\partial z^2} = -k_0^2 [\mu(z)\epsilon(z) - \alpha^2] U(z) + ik_0 \frac{\partial \mu(z)}{\partial z} \frac{\partial U(z)}{\partial z} \frac{1}{ik_0\mu(z)},$$

como $\frac{\partial \ln[\mu(z)]}{\partial z} = \frac{\partial \mu / \partial z}{\mu}$, entonces

$$\frac{\partial^2 U(z)}{\partial z^2} = -k_0^2 (n^2 - \alpha^2) U(z) + \frac{\partial \ln \mu(z)}{\partial z} \frac{\partial U(z)}{\partial z},$$

donde $n^2 = \mu(z)\epsilon(z)$. Finalmente,

$$\frac{d^2 U(z)}{dz^2} - \frac{d}{dz} \left[\ln \mu(z) \right] \frac{dU(z)}{dz} + k_0^2 (n^2 - \alpha^2) U(z) = 0. \quad (1.64)$$

Derivando la Ec. (1.61) con respecto a la variable z

$$\frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} = ik_0 \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right] U(z) + \frac{\partial U(z)}{\partial z} \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right] \right\},$$

y renombrando $f(z) = \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right]$, entonces

$$\frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} = ik_0 \left[\frac{\partial f(z)}{\partial z} U(z) + \frac{\partial U(z)}{\partial z} f(z) \right]. \quad (1.65)$$

Utilizando las Ecs. (1.59) y (1.61) se reescribe a $U(z)$ y $\frac{\partial U(z)}{\partial z}$ en términos de $V(z)$ y $\frac{\partial V(z)}{\partial z}$, y al sustituir en la Ec. (1.65) se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} &= ik_0 \left[\frac{\partial f(z)}{\partial z} \frac{1}{ik_0 f(z)} \frac{\partial V(z)}{\partial z} + ik_0 \mu V(z) f(z) \right] = \left[\frac{\partial f(z)}{\partial z} \frac{1}{f(z)} \frac{\partial V(z)}{\partial z} - k_0^2 f(z) \mu V(z) \right], \\ \frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} &= \frac{\partial}{\partial z} \left[\ln f(z) \right] \frac{\partial V(z)}{\partial z} - f(z) k_0^2 \mu V(z) = \frac{\partial}{\partial z} \left[\ln \left(\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right) \right] \frac{\partial V(z)}{\partial z} - k_0^2 (n^2 + \alpha^2) V(z). \end{aligned} \quad (1.66)$$

Finalmente,

$$\frac{d^2 V(z)}{dz^2} - \frac{d}{dz} \left[\ln \left(\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right) \right] \frac{dV(z)}{dz} + k_0^2 (n^2 - \alpha^2) V(z) = 0. \quad (1.67)$$

Las Ecs. (1.64) y (1.67) satisfacen la Ec. (1.50), la cual relaciona a los campos \vec{E} y \vec{H} .

Polarización p

Las ecuaciones de Maxwell presentan una simetría conocida como regla de sustitución que consiste en una vez conocidos los valores de \vec{E} es posible conocer los valores de \vec{H} al intercambiar \vec{E} por \vec{H} y simultáneamente ϵ por μ . Esto es útil cuando se quiere calcular las expresiones para una

onda con polarización p ($H_x \neq 0, H_y = H_z = 0$) a partir de los resultados obtenidos para una onda con polarización s . Las componentes del campo que no son nulas tienen [en analogía con las Ecs. (1.55) - (1.57)] la siguiente forma

$$H_x(y, z) = U(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}, \quad (1.68a)$$

$$E_y(y, z) = -V(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}, \quad (1.68b)$$

$$E_z(y, z) = -W(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)}. \quad (1.68c)$$

De manera análoga al caso de polarización s , se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales para polarización p

$$\frac{\partial U(z)}{\partial z} = ik_0\epsilon(z)V(z), \quad (1.69a)$$

$$\frac{\partial V(z)}{\partial z} = ik_0\left[\mu(z) - \frac{\alpha^2}{\epsilon(z)}\right]U(z), \quad (1.69b)$$

y la relación entre $U(z)$ y $V(z)$ está dada por [en analogía con la Ec. (1.60)]

$$\alpha U(z) + \epsilon(z)V(z) = 0. \quad (1.70)$$

Entonces, las funciones complejas $U(z)$ y $V(z)$ satisfacen las siguientes ecuaciones de segundo orden:

$$\frac{d^2 U(z)}{dz^2} - \frac{d}{dz} \left[\ln \epsilon(z) \right] \frac{dU(z)}{dz} + k_0^2(n^2 - \alpha^2)U(z) = 0, \quad (1.71a)$$

$$\frac{d^2 V(z)}{dz^2} - \frac{d}{dz} \left[\ln \left(\mu(z) + \frac{\alpha^2}{\epsilon(z)} \right) \right] \frac{dV(z)}{dz} + k_0^2(n^2 - \alpha^2)V(z) = 0. \quad (1.71b)$$

Amplitud y fase de la onda electromagnética con polarización s

Las funciones $U(z)$, $V(z)$ y $W(z)$ son en general funciones complejas de la variable z . Las superficies de amplitud constante de $E_x(y, z)$, $H_y(y, z)$, $H_z(y, z)$ están dadas por

$$\left| U(z) \right| = cte, \quad \left| V(z) \right| = cte, \quad \left| W(z) \right| = cte,$$

mientras que las superficies de fase constante cumplen con la siguiente ecuación

$$\phi(z) + k_0\alpha y = cte,$$

donde $\phi(z)$ es la fase de $U(z)$. El conjunto de estas dos superficies generalmente no coincide, así que $E_x(y, z)$ [y similarmente $H_y(y, z)$, $H_z(y, z)$] son ondas heterogéneas. Para un desplazamiento

(dy, dz) a lo largo de una superficie de fase constante

$$\frac{d\phi(z)}{dz} dz + k_0 \alpha dy = 0,$$

y si θ denota el ángulo entre la normal y el eje \hat{z} , entonces

$$\tan \theta = -\frac{dz}{dy}.$$

En el caso especial cuando la onda es homogénea se tiene que

$$\phi(z) = k_0 n z \cos \theta, \quad \alpha = n \sin \theta. \quad (1.72)$$

La relación

$$\alpha = cte,$$

impuesta por la Ec. (1.53) puede considerarse como una generalización de la *ley de refracción de Snell* para medios estratificados.

La matriz de transferencia de un medio estratificado

Las Ecs. (1.64) y (1.67) satisfacen las ecuaciones diferenciales acopladas dadas por las Ecs. (1.38) para una onda electromagnética plana y armónica en tiempo, que incide sobre un medio estratificado, y éstas a su vez satisfacen la Ec. (1.50), la cual relaciona a los campos \vec{E} y \vec{H} . Las funciones $U(z)$ y $V(z)$ pueden ser representadas como la combinación de dos soluciones particulares $U_1(z)$, $U_2(z)$ y $V_1(z)$, $V_2(z)$. Estas soluciones no pueden ser arbitrarias, por lo que deben estar acopladas de acuerdo con las ecuaciones diferenciales de las Ecs. (1.59) y (1.61), de esta forma se tiene

$$\frac{\partial U_1(z)}{\partial z} = ik_0 \mu(z) V_1(z), \quad (1.73a)$$

$$\frac{\partial V_1(z)}{\partial z} = ik_0 \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right] U_1(z), \quad (1.73b)$$

$$\frac{\partial U_2(z)}{\partial z} = ik_0 \mu(z) V_2(z), \quad (1.73c)$$

$$\frac{\partial V_2(z)}{\partial z} = ik_0 \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right] U_2(z). \quad (1.73d)$$

De las Ecs. (1.73a) y (1.73c) se tiene que

$$V_1(z) = \frac{\partial U_1(z)}{\partial z} \frac{1}{ik_0 \mu(z)}, \quad (1.74)$$

y

$$V_2(z) = \frac{\partial U_2(z)}{\partial z} \frac{1}{ik_0 \mu(z)}. \quad (1.75)$$

Multiplicando la Ec. (1.74) por $\frac{\partial U_2(z)}{\partial z}$ y la Ec. (1.75) por $\frac{\partial U_1(z)}{\partial z}$ y restándolas, se obtiene

$$V_1(z) \frac{\partial U_2(z)}{\partial z} - \frac{\partial U_1(z)}{\partial z} V_2(z) = 0, \quad (1.76)$$

es decir,

$$\frac{\partial U_1(z)}{\partial z} \frac{\partial U_2(z)}{\partial z} \frac{1}{ik_0\mu(z)} - \frac{\partial U_2(z)}{\partial z} \frac{\partial U_1(z)}{\partial z} \frac{1}{ik_0\mu(z)} = 0. \quad (1.77)$$

Multiplicando la Ec. (1.73b) por $U_2(z)$ y la Ec. (1.73d) por $U_1(z)$ y restándolas, se obtiene

$$U_1(z) \frac{\partial V_2(z)}{\partial z} - \frac{\partial V_1(z)}{\partial z} U_2(z) = 0, \quad (1.78)$$

es decir

$$ik_0 \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right] U_1(z) U_2(z) - ik_0 \left[\epsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right] U_2(z) U_1(z) = 0. \quad (1.79)$$

Derivando la expresión $U_1(z)V_2(z) - U_2(z)V_1(z)$ respecto a la variable z se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} [U_1(z)V_2(z) - U_2(z)V_1(z)] &= U_1(z) \frac{\partial V_2(z)}{\partial z} - V_1(z) \frac{\partial U_2(z)}{\partial z} + \frac{\partial U_1(z)}{\partial z} V_2(z) \\ &\quad - U_2(z) \frac{\partial V_1(z)}{\partial z} = 0. \end{aligned} \quad (1.80)$$

La Ec. (1.80) implica que el determinante

$$D = \begin{vmatrix} U_1 & V_1 \\ U_2 & V_2 \end{vmatrix}, \quad (1.81)$$

asociado con cualesquiera dos soluciones arbitrarias de las Ecs. (1.59) y (1.61) es constante. La selección más conveniente de soluciones particulares es:

$$U_1(z) = f(z), \quad (1.82a)$$

$$U_2(z) = F(z), \quad (1.82b)$$

$$V_1(z) = g(z), \quad (1.82c)$$

$$V_2(z) = G(z), \quad (1.82d)$$

tales que

$$U(0) = U_1(0) + U_2(0) = f(0) + F(0) = 0 + 1, \quad (1.83)$$

$$V(0) = V_1(0) + V_2(0) = g(0) + G(0) = 1 + 0, \quad (1.84)$$

es decir,

$$f(0) = G(0) = 0 \quad \text{y} \quad F(0) = g(0) = 1. \quad (1.85)$$

De esta forma, las soluciones con

$$U(0) = U_0 \quad \text{y} \quad V(0) = V_0, \quad (1.86)$$

se pueden expresar de la forma

$$U = FU_0 + fV_0, \quad (1.87a)$$

$$V = GU_0 + gV_0, \quad (1.87b)$$

o en forma matricial

$$Q = NQ_0, \quad (1.88)$$

donde

$$Q = \begin{bmatrix} U(z) \\ V(z) \end{bmatrix}, \quad Q_0 = \begin{bmatrix} U_0(z) \\ V_0(z) \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad N = \begin{bmatrix} F(z) & f(z) \\ G(z) & g(z) \end{bmatrix}. \quad (1.89)$$

Considerando la relación $D = cte.$, Ec. (1.81), entonces el determinante de la matriz cuadrada N es una constante que se puede calcular considerando $z = 0$:

$$|N| = F(0)g(0) - G(0)f(0) = 1. \quad (1.90)$$

Es conveniente expresar $U_0(z)$ y $V_0(z)$ en términos de las funciones $U(z)$ y $V(z)$. La matriz inversa de N , está dada por⁶

$$M = \begin{bmatrix} g(z) & -f(z) \\ -G(z) & F(z) \end{bmatrix}, \quad (1.91)$$

entonces

$$Q_0 = MQ, \quad (1.92)$$

donde M cumple que su determinante $|M| = 1$. La matriz M relaciona las componentes de los campos eléctricos y magnéticos en el plano $z = 0$, con las componentes en un plano arbitrario $z = cte.$ Para conocer la relación es suficiente conocer $U(z)$ y $V(z)$, por lo tanto:

Con el propósito de determinar la propagación de una onda plana monocromática a través de un medio estratificado, es suficiente especificar el medio con una matriz de dos por dos unimodular M .

A la matriz M se conoce como *matriz de transferencia del medio estratificado*, y el hecho de que el determinante de M sea constante da cuenta de la conservación de la energía [15]. A continuación se considera la forma de la matriz de transferencia para casos de interés particular.

Película dieléctrica homogénea

En el caso de una película dieléctrica homogénea $\epsilon(z)$ y $\mu(z)$ son funciones que dependen sólo de la frecuencia, por lo tanto $n = \sqrt{\epsilon\mu}$ también depende únicamente de la frecuencia.. Si θ denota el ángulo que forma el vector de propagación respecto a la normal a la interfaz entre los medios

⁶La matriz inversa de una matriz cuadrada A está dada por $A^{-1} = \frac{1}{\det A} \text{Adj}[A^{tr}]$.

estratificados (eje \hat{z} en la Fig. 1.2), se tiene [Ec. (1.72)]

$$\alpha = n \operatorname{sen} \theta. \quad (1.93)$$

Para una onda electromagnética con polarización s , es conveniente sustituir el valor de $\alpha = n \operatorname{sen} \theta$ en las Ecs. (1.64) y (1.67). Dado que los términos que involucran las derivadas espaciales de las funciones $\mu(z)$ y $\epsilon(z)$ son cero, las Ecs. (1.64) y (1.67) se reducen a

$$\frac{d^2 U(z)}{dz^2} + k_0^2 n^2 \cos^2 \theta U(z) = 0, \quad (1.94a)$$

$$\frac{d^2 V(z)}{dz^2} + k_0^2 n^2 \cos^2 \theta V(z) = 0. \quad (1.94b)$$

Las soluciones a las Ecs. (1.94) son funciones armónicas que, sujetas a las Ecs. (1.59) y (1.61), se reescriben como

$$U(z) = A \cos(k_0 n z \cos \theta) + B \operatorname{sen}(k_0 n z \cos \theta), \quad (1.95a)$$

$$V(z) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \cos \theta [B \cos(k_0 n z \cos \theta) - A \operatorname{sen}(k_0 n z \cos \theta)]. \quad (1.95b)$$

Aplicando las condiciones de frontera [Ec. (1.85)] en las Ecs. (1.95), se obtiene

$$f(z) = U_1(z) = B \operatorname{sen}(k_0 n z \cos \theta), \quad g(z) = V_1(z) = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \cos \theta [B \cos(k_0 n z \cos \theta)],$$

$$F(z) = U_2(z) = A \cos(k_0 n z \cos \theta), \quad G(z) = V_2(z) = -\frac{1}{i} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \cos \theta [A \operatorname{sen}(k_0 n z \cos \theta)].$$

De la Ec. (1.85) se tiene que $F(0) = g(0) = 1$, por lo que

$$A = 1 \quad \text{y} \quad B = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}} \frac{i}{\cos \theta},$$

de esta forma

$$U_1(z) = f(z) = \frac{i}{\cos \theta} \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}} \operatorname{sen}(k_0 n z \cos \theta), \quad (1.96a)$$

$$V_1(z) = g(z) = \cos(k_0 n z \cos \theta), \quad (1.96b)$$

$$U_2(z) = F(z) = \cos(k_0 n z \cos \theta), \quad (1.96c)$$

$$V_2(z) = G(z) = i \cos \theta \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \operatorname{sen}(k_0 n z \cos \theta). \quad (1.96d)$$

Denotando

$$\wp = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \cos \theta, \quad (1.97)$$

la matriz característica para una película dieléctrica homogénea se reescribe como

$$M(z) = \begin{bmatrix} \cos(k_0 n z \cos \theta) & -\frac{i}{\varphi} \operatorname{sen}(k_0 n z \cos \theta) \\ -i\varphi \operatorname{sen}(k_0 n z \cos \theta) & \cos(k_0 n z \cos \theta) \end{bmatrix}. \quad (1.98)$$

Para una onda con polarización p , resulta la misma matriz característica con φ remplazada por $\bar{\vartheta}$:

$$\bar{\vartheta} = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}} \cos \theta. \quad (1.99)$$

1.2.2. Coeficientes de reflexión y transmisión

Cuando una onda electromagnética incide en la interfaz plana entre dos medios homogéneos e isotrópicos, tanto la onda reflejada como transmitida sufren un cambio en su fase y amplitud. El cociente entre la amplitud del campo eléctrico reflejado y transmitido y la amplitud de campo eléctrico incidente se conoce respectivamente como coeficientes de reflexión y transmisión de la onda. A continuación se derivan expresiones para las amplitudes de las ondas reflejadas y transmitidas de una onda con polarización s en dirección \hat{x} , armónica en el tiempo, que incide en la interfaz plana de un medio estratificado que se extiende desde $z = 0$ hasta $z = z_1$. El medio estratificado está rodeado por un material semi infinito y homogéneo, ver Fig. 1.3.

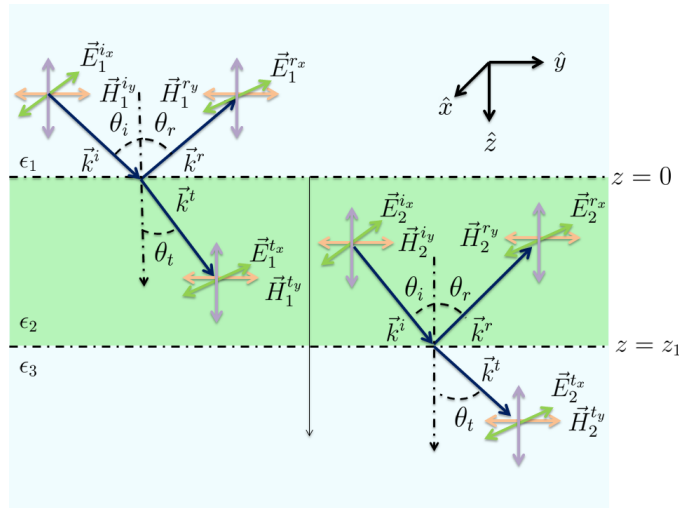


Fig. 1.3: Una onda con polarización s , armónica en el tiempo y que se propaga en la dirección z , incide sobre un medio estratificado caracterizado por una capa que se extiende desde $z = 0$ hasta $z = z_1$. La respuesta de los medios está dada por las permitividades eléctricas ϵ_i y permeabilidades magnéticas μ_i , con $i = 1, 2, 3$. El sistema es iluminado en configuración de incidencia externa.

Para analizar el medio estratificado se denotan a A , R y T como las amplitudes complejas del

vector eléctrico de la onda incidente, reflejada y transmitida, respectivamente:

$$\vec{E}^{(i)}(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}^{(i)} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (1.100a)$$

$$\vec{E}^{(r)}(\vec{r}, t) = R e^{i(\vec{k}^{(r)} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (1.100b)$$

$$\vec{E}^{(t)}(\vec{r}, t) = T e^{i(\vec{k}^{(t)} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (1.100c)$$

Cada una de las películas que conforma el medio estratificado está caracterizada por su función dieléctrica y su permeabilidad magnética. ϵ_1 , μ_1 y ϵ_l , μ_l denotan a las funciones dieléctricas y las permeabilidades magnéticas del primer y último medio, mientras que θ_1 y θ_l son los ángulos respecto a la normal que hacen los vectores de onda incidente y transmitido con respecto al eje \hat{z} (dirección de estratificación), ver Fig. 1.3. Las condiciones de frontera sobre los campos electromagnéticos demandan que la componente tangencial del campo eléctrico \vec{E} y del campo \vec{H} deben ser continuas a través de las dos fronteras del medio estratificado. Utilizando la ley de Faraday

$$\vec{H} = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \hat{k} \times \vec{E},$$

se obtienen expresiones, Ec. (1.89), para una onda con polarización s evaluadas en la frontera del primer y último medio, ver Fig. 1.3, con lo que se tiene el siguiente conjunto de ecuaciones

$$U(z=0) = U_0 = A + R, \quad (1.101a)$$

$$U(z=z_1) = U(z_1) = T, \quad (1.101b)$$

$$V(z=0) = V_0 = \wp_1(A - R), \quad (1.101c)$$

$$V(z=z_1) = V(z_1) = \wp_l T, \quad (1.101d)$$

donde

$$\wp_1 = \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 \quad \text{y} \quad \wp_l = \sqrt{\frac{\epsilon_l}{\mu_l}} \cos \theta_l. \quad (1.102)$$

Las cuatro cantidades U_0 , V_0 , U y V que aparecen en las Ecs. (1.101) están relacionadas por medio de la Ec. (1.92) de la siguiente forma

$$\begin{bmatrix} U_0 \\ V_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U(z_1) \\ V(z_1) \end{bmatrix},$$

de manera que

$$U_0 = m_{11}U(z_1) + m_{12}V(z_1),$$

$$V_0 = m_{21}U(z_1) + m_{22}V(z_1),$$

entonces

$$A + R = (m_{11} + m_{12}\wp_l)T, \quad (1.103a)$$

$$\wp_1(A - R) = (m_{11} + m_{12}\wp_l)T, \quad (1.103b)$$

donde m_{ij} son los elementos de la matriz de transferencia del medio evaluados en $z = z_1$. Dividiendo cada uno de los términos de la Ec. (1.103) por la amplitud de la onda incidente A se tiene

$$1 + r = (m_{11} + m_{12}\varphi_l)t, \quad (1.104)$$

$$\varphi_1(1 - r) = (m_{21} + m_{22}\varphi_l)t. \quad (1.105)$$

Despejando t de la Ec. (1.104) y sustituyendo en la Ec. (1.105), se obtiene

$$t = \frac{1 + r}{(m_{11} + m_{12}\varphi_l)}, \quad \text{entonces} \quad \varphi_1(1 - r) = \frac{(1 + r)(m_{21} + m_{22}\varphi_l)}{(m_{11} + m_{12}\varphi_l)},$$

y despejando el término $(m_{11} + m_{12}\varphi_l)$ de la expresión anterior, se tiene

$$\varphi_1(m_{11} + m_{12}\varphi_l)(1 - r) = (1 + r)(m_{21} + m_{22}\varphi_l),$$

$$\varphi_1(m_{11} + m_{12}\varphi_l) - \varphi_1(m_{11} + m_{12}\varphi_l)r = (m_{21} + m_{22}\varphi_l) + (m_{21} + m_{22}\varphi_l)r,$$

$$\varphi_1(m_{11} + m_{12}\varphi_l) - (m_{21} + m_{22}\varphi_l) = r[(m_{21} + m_{22}\varphi_l) + \varphi_1(m_{11} + m_{12}\varphi_l)],$$

por lo tanto

$$r = \frac{(m_{11} + m_{12}\varphi_l)\varphi_1 - (m_{21} + m_{22}\varphi_l)}{(m_{11} + m_{12}\varphi_l)\varphi_1 + (m_{21} + m_{22}\varphi_l)}. \quad (1.106)$$

Despejando r de las Ecs. (1.104) y (1.105) se obtiene, respectivamente,

$$r = (m_{11} + m_{12}\varphi_l)t - 1 \quad \text{y} \quad r = -\frac{(m_{21} + m_{22}\varphi_l)t}{\varphi_1} + 1,$$

igualando

$$(m_{11} + m_{12}\varphi_l)t - 1 = -\frac{(m_{21} + m_{22}\varphi_l)t}{\varphi_1} + 1,$$

$$(m_{11} + m_{12}\varphi_l)t + \frac{(m_{21} + m_{22}\varphi_l)t}{\varphi_1} = 2,$$

$$(m_{11} + m_{12}\varphi_l)\varphi_1 t + (m_{21} + m_{22}\varphi_l)t = 2\varphi_1,$$

entonces

$$t = \frac{2\varphi_1}{(m_{11} + m_{12}\varphi_l)\varphi_1 + (m_{21} + m_{22}\varphi_l)}. \quad (1.107)$$

De las Ec. (1.106) y (1.107) se obtienen

$$r = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{A}} = \frac{(m_{11} + m_{12}\varphi_l)\varphi_1 - (m_{21} + m_{22}\varphi_l)}{(m_{11} + m_{12}\varphi_l)\varphi_1 + (m_{21} + m_{22}\varphi_l)}, \quad (1.108)$$

y

$$t = \frac{\mathcal{T}}{\mathcal{A}} = \frac{2\varphi_1}{(m_{11} + m_{12}\varphi_l)\varphi_1 + (m_{21} + m_{22}\varphi_l)}. \quad (1.109)$$

En términos de los coeficientes de reflexión r y transmisión t se define la reflectancia \mathcal{R} y la

transmitancia \mathcal{T} como [13]

$$\mathcal{R} = |r|^2, \quad \mathcal{T} = \frac{\wp_l}{\wp_1} |t|^2. \quad (1.110)$$

La formulación correspondiente para las ondas con polarización p se obtiene de forma inmediata a partir de las Ecs. (1.108) - (1.110) reemplazando las cantidades \wp_1 y \wp_l por

$$\check{\wp}_1 = \sqrt{\frac{\mu_1}{\epsilon_1}} \cos \theta_1, \quad \check{\wp}_l = \sqrt{\frac{\mu_l}{\epsilon_l}} \cos \theta_l. \quad (1.111)$$

En la formulación para las ondas con polarización p , los coeficientes de reflexión r y transmisión t corresponden al cociente entre la amplitud del campo H reflejado y transmitido, respectivamente, entre la amplitud del campo H incidente.

Propagación de una onda electromagnética a través de una película dieléctrica homogénea

La matriz de transferencia de una película dieléctrica homogénea, no magnética ($\mu = 1$), que es iluminada por una onda con polarización s , ver Fig. 1.3, está dada por la Ec. (1.98)

$$M(z) = \begin{bmatrix} \cos(k_0 n z \cos \theta) & -\frac{i}{\wp} \sin(k_0 n z \cos \theta) \\ -i\wp \sin(k_0 n z \cos \theta) & \cos(k_0 n z \cos \theta) \end{bmatrix}.$$

Denotando por los subíndices 1 y 2 a las cantidades correspondientes a los medios 1 y 2, se tiene que

$$m_{11} = m_{22} = \cos \beta, \quad m_{12} = \frac{-i}{\wp_2} \sin \beta, \quad m_{21} = -i\wp_2 \sin \beta, \quad (1.112)$$

con

$$\beta = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_2 h \cos \theta_2,$$

donde h es el grosor de la película y

$$\wp_2 = n_2 \cos \theta_2. \quad (1.113)$$

Los coeficientes de reflexión y transmisión r y t de la onda con polarización s se obtienen al sustituir las Ecs. (1.112) y (1.113) en las Ecs. (1.108) y (1.109) con $l = 3$, que corresponde al sistema mostrado en la Fig. 1.3.

Coefficiente de reflexión r , onda con polarización s

Para la formulación del coeficiente de reflexión r de una onda con polarización s , se tiene que

$$r_{12}^{(s)} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} = \frac{\wp_1 - \wp_2}{\wp_1 + \wp_2}, \quad (1.114)$$

y

$$r_{23}^{(s)} = \frac{n_2 \cos \theta_2 - n_3 \cos \theta_3}{n_2 \cos \theta_2 + n_3 \cos \theta_3} = \frac{\wp_2 - \wp_3}{\wp_2 + \wp_3}. \quad (1.115)$$

De la Ec. (1.108)

$$r_{123}^{(s)} = \frac{(m_{11} + m_{12}\wp_3)\wp_1 - (m_{21} + m_{22}\wp_3)}{(m_{11} + m_{12}\wp_3)\wp_1 + (m_{21} + m_{22}\wp_3)} = \frac{m_{11}\wp_1 + m_{12}\wp_1\wp_3 - m_{21} - m_{22}\wp_3}{m_{11}\wp_1 + m_{12}\wp_1\wp_3 + m_{21} + m_{22}\wp_3},$$

y sustituyendo los valores de la Ec. (1.112), entonces

$$r_{123}^{(s)} = \frac{\wp_1 \cos \beta - \frac{i}{\wp_2} \wp_1 \wp_3 \sin \beta + i \wp_2 \sin \beta - \wp_3 \cos \beta}{\wp_1 \cos \beta - \frac{i}{\wp_2} \wp_1 \wp_3 \sin \beta - i \wp_2 \sin \beta + \wp_3 \cos \beta} = \frac{(\wp_1 - \wp_3) \cos \beta - i \left(\frac{\wp_1 \wp_3}{\wp_2} - \wp_2 \right) \sin \beta}{(\wp_1 + \wp_3) \cos \beta - i \left(\frac{\wp_1 \wp_3}{\wp_2} + \wp_2 \right) \sin \beta},$$

o bien

$$r_{123}^{(s)} = \frac{\wp_2(\wp_1 - \wp_3) \cos \beta - i(\wp_1 \wp_3 - \wp_2^2) \sin \beta}{\wp_2(\wp_1 + \wp_3) \cos \beta - i(\wp_1 \wp_3 + \wp_2^2) \sin \beta}.$$

Multiplicando $r_{123}^{(s)}$ por

$$\frac{2}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)} / \frac{2}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)},$$

se tiene que

$$r_{123}^{(s)} = \frac{\left[\frac{2\wp_2(\wp_1 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)} \right] \cos \beta - i \left[\frac{2(\wp_1 \wp_3 - \wp_2^2)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)} \right] \sin \beta}{\left[\frac{2\wp_2(\wp_1 + \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)} \right] \cos \beta - i \left[\frac{2(\wp_1 \wp_3 + \wp_2^2)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)} \right] \sin \beta}. \quad (1.116)$$

Por otra parte, de las Ecs. (1.114) y (1.115), se tiene que

$$r_{12}^{(s)} + r_{23}^{(s)} = \frac{\wp_1 - \wp_2}{\wp_1 + \wp_2} + \frac{\wp_2 - \wp_3}{\wp_2 + \wp_3} = \frac{(\wp_1 - \wp_2)(\wp_2 + \wp_3) + (\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)},$$

entonces

$$r_{12}^{(s)} + r_{23}^{(s)} = \frac{2\wp_2(\wp_1 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}. \quad (1.117)$$

De las Ecs. (1.114) y (1.115), se tiene que

$$r_{12}^{(s)} - r_{23}^{(s)} = \frac{\wp_1 - \wp_2}{\wp_1 + \wp_2} - \frac{\wp_2 - \wp_3}{\wp_2 + \wp_3} = \frac{(\wp_1 - \wp_2)(\wp_2 + \wp_3) - (\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)},$$

entonces

$$r_{12}^{(s)} - r_{23}^{(s)} = \frac{2(\wp_1 \wp_2 - \wp_2^2)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}. \quad (1.118)$$

Para la formulación del coeficiente de reflexión de una onda con polarización s , es conveniente analizar las cantidades $r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)}$ y $1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)}$:

$$r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} = \frac{(\wp_1 - \wp_2)(\wp_2 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)},$$

a partir de la expresión anterior, se tiene

$$1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} = 1 + \frac{(\wp_1 - \wp_2)(\wp_2 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)} = \frac{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3) + (\wp_1 - \wp_2)(\wp_2 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)},$$

entonces

$$1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} = \frac{2\wp_2(\wp_1 + \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}, \quad (1.119)$$

también

$$1 - r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} = 1 - \frac{(\wp_1 - \wp_2)(\wp_2 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)} = \frac{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3) - (\wp_1 - \wp_2)(\wp_2 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)},$$

entonces

$$1 - r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} = \frac{2(\wp_1\wp_3 + \wp_2^2)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}. \quad (1.120)$$

Sustituyendo las Ecs. (1.117) - (1.120) en la Ec. (1.116) se obtiene

$$r_{123}^{(s)} = \frac{\left[\frac{2\wp_2(\wp_1 - \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}\right] \cos \beta - i \left[\frac{2(\wp_1\wp_3 - \wp_2^2)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}\right] \sin \beta}{\left[\frac{2\wp_2(\wp_1 + \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}\right] \cos \beta - i \left[\frac{2(\wp_1\wp_3 + \wp_2^2)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}\right] \sin \beta} = \frac{(r_{12}^{(s)} + r_{23}^{(s)}) \cos \beta - i(r_{12}^{(s)} - r_{23}^{(s)}) \sin \beta}{(1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)}) \cos \beta - i(1 - r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)}) \sin \beta},$$

$$r_{123}^{(s)} = \frac{r_{12}^{(s)} (\cos \beta - i \sin \beta) + r_{23}^{(s)} (\cos \beta + i \sin \beta)}{\cos \beta - i \sin \beta + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} (\cos \beta + i \sin \beta)} = \frac{r_{12}^{(s)} e^{-i\beta} + r_{23}^{(s)} e^{i\beta}}{e^{-i\beta} + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} e^{i\beta}}. \quad (1.121)$$

Finalmente, multiplicando la Ec. (1.121) por $e^{i\beta}/e^{i\beta}$ se obtiene

$$r_{123}^{(s)} = \frac{r_{12}^{(s)} + r_{23}^{(s)} e^{2i\beta}}{1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} e^{2i\beta}}. \quad (1.122)$$

Coefficiente de reflexión r , onda con polarización p

De forma análoga, para el cálculo del coeficiente r para una onda con polarización p , se considera que

$$r_{12}^{(p)} = \frac{n_1 \cos \theta_2 - n_2 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_2 + n_2 \cos \theta_1} = \frac{\tilde{\delta}_1 - \tilde{\delta}_2}{\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2}, \quad (1.123)$$

y

$$r_{23}^{(p)} = \frac{n_2 \cos \theta_3 - n_3 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_3 + n_3 \cos \theta_2} = \frac{\tilde{\delta}_2 - \tilde{\delta}_3}{\tilde{\delta}_2 + \tilde{\delta}_3}, \quad (1.124)$$

donde los coeficientes $\tilde{\delta}$ están definidos por la Ec. (1.111). Siguiendo un procedimiento análogo al

de la polarización s , se obtiene

$$r_{123}^{(p)} = \frac{r_{12}^{(p)} + r_{23}^{(p)} e^{2i\beta}}{1 + r_{12}^{(p)} r_{23}^{(p)} e^{2i\beta}}. \quad (1.125)$$

Las Ecs. (1.122) y (1.125) son conocidas como *fórmula de los tres medios* o de *Landau-Lifshitz*, de una onda con polarización s y una onda con polarización p , respectivamente, que se refleja en una película dieléctrica homogénea entre dos medios no absorbentes.

Coefficiente de transmisión t , onda con polarización s

Para la formulación del coeficiente de transmisión t de una onda con polarización s , se tiene que

$$t_{12}^{(s)} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} = \frac{2\wp_1}{\wp_1 + \wp_2}, \quad (1.126)$$

y

$$t_{23}^{(s)} = \frac{2n_2 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_2 + n_3 \cos \theta_3} = \frac{2\wp_2}{\wp_2 + \wp_3}. \quad (1.127)$$

De la Ec. (1.109) se tiene que

$$t_{123}^{(s)} = \frac{2\wp_1}{(m_{11} + m_{12}\wp_3)\wp_1 + (m_{21} + m_{22}\wp_3)} = \frac{2\wp_1}{m_{11}\wp_1 + m_{12}\wp_1\wp_3 + m_{21} + m_{22}\wp_3}.$$

Sustituyendo los valores de los coeficientes m_{ij} , Ec. (1.112) en la Ec. (1.109), se obtiene

$$t_{123}^{(s)} = \frac{2\wp_1}{\wp_1 \cos \beta - \frac{i}{\wp_2} \wp_1 \wp_3 \sin \beta - i\wp_2 \sin \beta + \wp_3 \cos \beta} = \frac{2\wp_1}{(\wp_1 + \wp_3) \cos \beta - i\left(\frac{\wp_1 \wp_3}{\wp_2} + \wp_2\right) \sin \beta},$$

$$t_{123}^{(s)} = \frac{2\wp_2 \wp_1}{\wp_2(\wp_1 + \wp_3) \cos \beta - i(\wp_1 \wp_3 + \wp_2^2) \sin \beta}.$$

Multiplicando $t_{123}^{(s)}$ por

$$\frac{2}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)} / \frac{2}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)},$$

se tiene

$$t_{123}^{(s)} = \frac{\left[\frac{4\wp_2 \wp_1}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}\right]}{\left[\frac{2\wp_2(\wp_1 + \wp_3)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}\right] \cos \beta - i\left[\frac{2(\wp_1 \wp_3 + \wp_2^2)}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}\right] \sin \beta}. \quad (1.128)$$

Por otra parte, de las Ecs. (1.126) y (1.127), se tiene que

$$t_{12}^{(s)} t_{23}^{(s)} = \frac{2\wp_1}{\wp_1 + \wp_2} \frac{2\wp_2}{\wp_2 + \wp_3} = \frac{4\wp_1 \wp_2}{(\wp_1 + \wp_2)(\wp_2 + \wp_3)}. \quad (1.129)$$

Sustituyendo las Ecs. (1.119) y (1.120), y la Ec. (1.129), en la Ec. (1.128), se tiene como resultado

que

$$t_{123}^{(s)} = \frac{\left[\frac{4\varphi_2\varphi_1}{(\varphi_1+\varphi_2)(\varphi_2+\varphi_3)} \right]}{\left[\frac{2\varphi_2(\varphi_1+\varphi_3)}{(\varphi_1+\varphi_2)(\varphi_2+\varphi_3)} \right] \cos \beta - i \left[\frac{2(\varphi_1\varphi_3+\varphi_2^2)}{(\varphi_1+\varphi_2)(\varphi_2+\varphi_3)} \right] \operatorname{sen} \beta} = \frac{t_{12}^{(s)} t_{23}^{(s)}}{(1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)}) \cos \beta - i(1 - r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)}) \operatorname{sen} \beta}$$

$$t_{123}^{(s)} = \frac{t_{12}^{(s)} t_{23}^{(s)}}{(1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)}) \cos \beta - i(1 - r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)}) \operatorname{sen} \beta},$$

$$t_{123}^{(s)} = \frac{t_{12}^{(s)} t_{23}^{(s)}}{\cos \beta - i \operatorname{sen} \beta + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} (\cos \beta + i \operatorname{sen} \beta)} = \frac{t_{12}^{(s)} t_{23}^{(s)}}{e^{-i\beta} + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} e^{i\beta}}.$$

Finalmente, multiplicando por $e^{i\beta}/e^{i\beta}$ se obtiene

$$t_{123}^{(s)} = \frac{t_{12}^{(s)} t_{23}^{(s)} e^{i\beta}}{1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} e^{2i\beta}}. \quad (1.130)$$

Coefficiente de transmisión t , onda con polarización p

De forma análoga, para el cálculo del coeficiente de transmisión t para una onda con polarización p , se tiene que

$$t_{12}^{(p)} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_2 + n_2 \cos \theta_1} = \frac{2\check{\mathfrak{d}}_1 n_1}{n_2 \check{\mathfrak{d}}_1 + n_1 \check{\mathfrak{d}}_2}, \quad (1.131)$$

y

$$t_{23}^{(p)} = \frac{2n_2 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_3 + n_3 \cos \theta_2} = \frac{2\check{\mathfrak{d}}_2 n_2}{n_3 \check{\mathfrak{d}}_2 + n_2 \check{\mathfrak{d}}_3}, \quad (1.132)$$

donde los coeficientes $\check{\mathfrak{d}}$ están dados por la Ec. (1.111). Siguiendo un procedimiento análogo al de la polarización s , se tiene que

$$t_{123}^{(p)} = \frac{t_{12}^{(p)} t_{23}^{(p)} e^{i\beta}}{1 + r_{12}^{(p)} r_{23}^{(p)} e^{2i\beta}}. \quad (1.133)$$

Las Ecs. (1.130) y (1.133) son conocidas como *fórmula de los tres medios* o de *Landau-Lifshitz*, de una onda con polarización s y una onda con polarización p , respectivamente, que se transmite en una película dieléctrica homogénea entre dos medios no absorbentes.

1.3. Modelo dipolar

El modelo dipolar [11] es una teoría de medio efectivo anisótropa con la que es posible calcular la reflectancia (y transmitancia) de un arreglo de nanopartículas pequeñas (en comparación a la longitud de onda de la luz incidente) localizadas al azar, formando un sistema bidimensional, denominado monocapa [16]. El campo que excita a cada una de las esferas es debido al campo incidente y a la contribución de las demás esferas en la monocapa. El modelo dipolar supone que las partículas esféricas que conforman a la monocapa son suficientemente pequeñas como para que la contribución dominante sea la dipolar [11]. En el cálculo de la respuesta óptica de la monocapa, se considera al campo eléctrico generado por la carga superficial inducida en el sustrato, correspondiente a las cargas imágenes de las cargas dipolares en las esferas. En el modelo dipolar, para el cálculo de la respuesta óptica efectiva del material se utiliza la función de correlación-agujero [16].

1.3.1. Incidencia externa

En este trabajo de tesis, el objetivo es analizar si el máximo de absorbancia observada en una monocapa de nanopartículas de aluminio depositada al azar sobre cuarzo corresponde a la contribución dipolar de las partículas de aluminio. Las mediciones de absorbancia realizadas al sistema monocapa se hicieron en configuración de incidencia externa, por esta razón este trabajo se enfoca en analizar el modelo dipolar en configuración de iluminación a incidencia externa. El problema a resolver es el cálculo de la absorbancia a incidencia externa en un sistema monocapa sobre el cual incide una onda plana oscilando a una frecuencia ω , en presencia de una monocapa de partículas esféricas idénticas de aluminio con radio a y permitividad $\epsilon_s(\omega)$, localizadas al azar sobre la superficie de un sustrato, el cual ocupa el espacio $z > 0$ caracterizado con una permitividad ϵ_3 , ver Fig. 1.4.

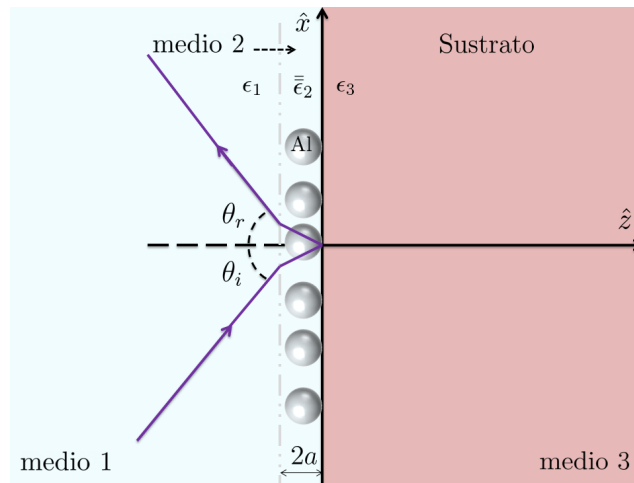


Fig. 1.4: Monocapa de nanopartículas esféricas idénticas de radio a y permitividad eléctrica $\epsilon_s(\omega)$ localizadas aleatoriamente sobre un sustrato con permitividad ϵ_3 . Las esferas están embebidas en un medio con permitividad eléctrica ϵ_1 y la onda incide desde el medio con ϵ_1 ($\epsilon_1 < \epsilon_3$).

Las esferas que conforman la monocapa se encuentran embebidas en un medio transparente con permitividad ϵ_1 , el tamaño de las esferas es suficientemente pequeño comparado a la longitud de onda incidente λ y el sistema suficientemente diluido, tal que la monocapa puede ser considerada como un sistema de dipolos eléctricos, caracterizada con una permitividad efectiva dada por

$$\bar{\epsilon}_2(\omega) = \begin{pmatrix} \epsilon_{||}(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{||}(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\perp}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (1.134)$$

donde $\epsilon_{||}(\omega)$ y $\epsilon_{\perp}(\omega)$ son la respuesta efectiva paralela y perpendicular, respectivamente, respecto al plano que separa al medio 1 y medio 3, ver Fig. 1.4.

El carácter tensorial de $\bar{\epsilon}_2(\omega)$ proviene de la geometría 2D de la monocapa. Es decir, su respuesta es distinta en el plano que ocupa la monocapa que en la dirección perpendicular.

La permitividad efectiva $\bar{\epsilon}_2$ de la monocapa de esferas idénticas, en términos de la susceptibilidad eléctrica $\bar{\chi}^{\text{ef}}(\omega)$, está dada por

$$\bar{\epsilon}_2 = \epsilon_1(\bar{1} + \bar{\chi}^{\text{ef}}), \quad (1.135)$$

donde $\bar{\chi}^{\text{ef}}(\omega)$ está definida a través de la relación

$$\vec{P} = \epsilon_1 \bar{\chi}^{\text{ef}} \cdot \vec{E}, \quad (1.136)$$

con \vec{P} el vector de polarización (momento dipolar por unidad de volumen) y \vec{E} es el campo eléctrico promedio en el espacio, también llamado campo macroscópico.

En presencia de un campo eléctrico incidente \vec{E}^{ext} en la interfaz ubicada en el plano $z = 0$ (ver Fig. 1.4) y, si la monocapa es muy delgada [$2a \ll \lambda_1(\cos \theta_1)$], se puede asumir que la componente paralela del campo eléctrico en la monocapa es aproximadamente la misma que la componente paralela del campo eléctrico incidente. Las condiciones de frontera requieren que la componente paralela (respecto al plano definido por la monocapa) del campo eléctrico sea continua a través de la interfaz, esto es

$$\vec{E}_{||} = \vec{E}_{||}^{\text{ext}}, \quad (1.137)$$

donde $\vec{E}_{||}^{\text{ext}}$ es la componente paralela del campo eléctrico externo justo en la interfaz localizada en $z = 0$. El campo eléctrico externo es la suma del campo incidente más el reflejado en el medio 1, ver Fig. 1.4.

Análogamente, debido a que la monocapa es muy delgada, se puede asumir que la componente perpendicular del vector desplazamiento en la monocapa es aproximadamente la misma que la componente perpendicular del vector de desplazamiento eléctrico externo. La condición de frontera sobre el vector de desplazamiento eléctrico que relaciona las componentes perpendiculares de \vec{D} imponen que, cuando no hay carga externa, éstas son continuas a través de la interfaz, entonces

$$D_{\perp} = \epsilon_2^{\perp} E_{\perp} = \epsilon_1 E_{\perp}^{\text{ext}}. \quad (1.138)$$

Las componentes paralela y transversal del vector de polarización $\vec{P} = (\vec{P}_{||}, \vec{P}_{\perp})$ se pueden escribir en términos de las Ecs. (1.137) y (1.138) a través de la Ec. (1.136), en términos del campo externo,

$$\vec{P}_{||} = \epsilon_1 \chi_2^{\parallel} \vec{E}_{||}^{\text{ext}}, \quad (1.139)$$

y

$$\vec{P}_\perp = \epsilon_1 \chi_2^\perp \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \vec{E}_\perp^{\text{ext}}. \quad (1.140)$$

Despejando $\bar{\chi}^{\text{ef}}(\omega)$ de la Ec. (1.135) y sustituyendo en la Ec. (1.139) se obtiene

$$\vec{P}_\parallel = \epsilon_1 \left(\frac{\epsilon_2^\parallel}{\epsilon_1} - \bar{1} \right) \vec{E}_\parallel^{\text{ext}},$$

entonces

$$\vec{P}_\parallel = (\epsilon_2^\parallel - \epsilon_1) \vec{E}_\parallel^{\text{ext}}. \quad (1.141)$$

Para la componente perpendicular, de manera análoga, se obtiene

$$\vec{P}_\perp = \epsilon_1 \left(\frac{\epsilon_2^\parallel}{\epsilon_1} - \bar{1} \right) \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \vec{E}_\perp^{\text{ext}},$$

entonces

$$\vec{P}_\perp = \epsilon_1 \left(\bar{1} - \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \vec{E}_\perp^{\text{ext}}, \quad (1.142)$$

de modo que se tiene una relación entre el campo de polarización y el campo eléctrico externo. Las Ecs. (1.141) y (1.142) relacionan las componentes paralela y perpendicular de la función dieléctrica efectiva $\epsilon_2^\parallel(\omega)$ y $\epsilon_2^\perp(\omega)$, con las componentes tanto del vector de polarización \vec{P} y el vector de campo eléctrico externo \vec{E} .

En el modelo dipolar se considera a la monocapa como una colección de $N \gg 1$ esferas idénticas no magnéticas, de radio a y permitividad $\epsilon_s(\omega)$, embebidas en un material con permitividad dieléctrica ϵ_1 y localizadas al azar sobre un sustrato con permitividad eléctrica ϵ_3 . El sustrato ocupa el espacio ($z > 0$) y la magnitud de la posición del centro de la j -ésima partícula respecto de la i -ésima partícula el plano $z = a$ está dado por R_{ij} , ver Fig. 1.5.

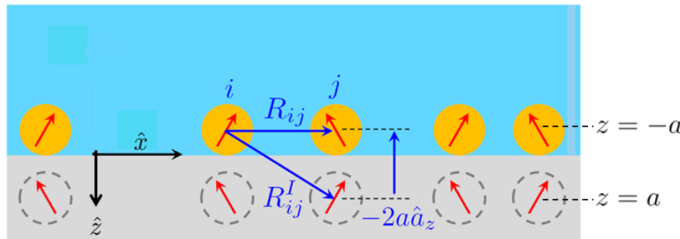


Fig. 1.5: Esquema de las partículas esféricas soportadas (círculos amarillos) formando una monocapa y sus imágenes inducidas en el sustrato (círculos grises punteados). Figura reproducida y adaptada de [16].

La monocapa se ilumina con una onda plana que oscila a frecuencia ω , polarizando las partículas con una longitud de onda asociada λ , mucho mas grande que el radio de las partículas. La suposición principal es que en cada una de las esferas se tiene un momento dipolar eléctrico inducido, el cual es proporcional a la polarizabilidad α_{pol} de las esferas multiplicado por el campo local \vec{E}^{loc} en cada una de ellas. El campo eléctrico local es igual al campo eléctrico externo \vec{E}^{ext} más el campo proveniente de los demás dipolos inducidos en el resto de las partículas, así como también el campo eléctrico que generan los dipolos imagen inducidos en el sustrato. Entonces, el

momento dipolar inducido en la i -ésima partícula está dado por

$$\vec{p}_i = \epsilon_1 \alpha_{pol} \left[\vec{E}^{ext} + \sum_{j=1}^N \bar{\bar{U}}_{ij} \cdot \vec{p}_j \right], \quad (1.143)$$

donde

$$\alpha_{pol} = 4\pi a^3 \frac{[\epsilon_s(\omega) - \epsilon_1]}{[\epsilon_s(\omega) + 2\epsilon_1]} \equiv 4\pi a^3 \tilde{\alpha}_{pol}, \quad (1.144)$$

es la polarizabilidad de las esferas, $\epsilon_s(\omega)$ es la permitividad eléctrica del material del cual están hechas las esferas, $N \gg 1$ y $\tilde{\alpha}_{pol}$ es la polarizabilidad adimensional. El tensor $\bar{\bar{U}}_{ij}$ está dado como

$$\bar{\bar{U}}_{ij} = \bar{\bar{U}}_{ij}^d + \bar{\bar{U}}_{ij}^I, \quad (1.145)$$

donde $\bar{\bar{U}}_{ij}^d$ es el tensor de momento dipolar correspondiente a los dipolos localizados sobre el sustrato a una distancia $z = -a$, mientras que $\bar{\bar{U}}_{ij}^I$ es el correspondiente a las imágenes localizadas a una distancia $z = a$, (ver Fig. 1.5). A partir de la Ec. (1.145), la Ec. (1.143) se reescribe como

$$\vec{p}_i = \epsilon_1 \alpha_{pol} \left[\vec{E}^{ext} + \sum_{j=1}^N (\bar{\bar{U}}_{ij}^d + \bar{\bar{U}}_{ij}^I) \cdot \vec{p}_j \right] = \epsilon_1 \alpha_{pol} \left[\vec{E}^{ext} + \sum_{j=1}^N (\bar{\bar{U}}_{ij}^d \cdot \vec{p}_j + \bar{\bar{U}}_{ij}^I \cdot \vec{p}_j) \right],$$

donde $\bar{\bar{U}}_{ij}^d \cdot \vec{p}_j$ es el campo eléctrico en el punto \vec{R}_i producido por un dipolo \vec{p}_j en \vec{R}_j , y $\bar{\bar{U}}_{ij}^I \cdot \vec{p}_j$ es el campo eléctrico producido en \vec{R}_i por la imagen del dipolo \vec{p}_j . La expresión explícita del tensor dipolar es [11]

$$\bar{\bar{U}}_{ij}^d = (1 - \delta_{ij}) \frac{3\hat{R}_{ij}\hat{R}_{ij} - \bar{\bar{1}}}{4\pi\epsilon_1 R_{ij}^3}, \quad (1.146)$$

donde $\vec{R}_{ij} \equiv \vec{R}_i - \vec{R}_j$, R_{ij} denota la magnitud del vector \vec{R}_{ij} , \hat{R}_{ij} denota al vector unitario y el factor $(1 - \delta_{ij})$ indica que se omite de la suma la auto interacción del i -ésimo dipolo. De forma análoga

$$\bar{\bar{U}}_{ij}^I = \frac{3\hat{R}_{ij}^I \hat{R}_{ij}^I - \bar{\bar{1}}}{4\pi\epsilon_1 R_{ij}^{I3}} \cdot \bar{\bar{M}}, \quad (1.147)$$

donde $\vec{R}_{ij}^I \equiv \vec{R}_i - \vec{R}_j - 2a\hat{e}_z$, R_{ij}^I es la distancia entre el i -ésimo dipolo y la imagen del j -ésimo dipolo, \hat{R}_{ij}^I denota el vector unitario y la matriz

$$\bar{\bar{M}} = \frac{\epsilon_3 - \epsilon_1}{\epsilon_3 + \epsilon_1} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.148)$$

da cuenta sobre la magnitud y el cambio en la dirección del dipolo imagen inducido en el sustrato. A diferencia de la suma de los dipolos reales, la suma sobre j en la contribución de los dipolos imagen, Ec. (1.143), sí incluye la auto imagen del i -ésimo dipolo imagen.

El problema consiste en resolver el conjunto de ecuaciones lineales de la Ec. (1.143) para \vec{p}_i en términos de \vec{E}^{ext} , para posteriormente calcular las componentes del vector de polarización (\vec{P}^{\parallel} , \vec{P}^{\perp}) y junto con las Ecs. (1.141) y (1.142) obtener expresiones para ϵ_2^{\parallel} y ϵ_2^{\perp} , respectivamente.

Monocapa desordenada

Las esferas metálicas que forman la monocapa están localizadas aleatoriamente sobre un sustrato, entonces las matrices \bar{U}_{ij} y \bar{U}_{ij}^I resultan ser matrices aleatorias. Utilizando la aproximación de campo medio (MFA, por sus siglas en inglés *Mean Field Approximation*), se resuelve el sistema de ecuaciones dado por la Ec. (1.143). Esto significa que el desorden en dos dimensiones en la posición de las esferas sobre el sustrato es en promedio homogéneo e isotrópo, y $\vec{P}_{||}$ apunta en la dirección de $\vec{E}_{||}^{\text{ext}}$. Entonces, el promedio configuracional $\langle \vec{p} \rangle$ de los dipolos inducidos \vec{p}_i apuntará en la dirección de \vec{E}^{ext} y se puede escribir que

$$\vec{p}_i = \langle \vec{p} \rangle + \Delta \vec{p}_i, \quad (1.149)$$

donde $\Delta \vec{p}_i$ son las fluctuaciones alrededor del promedio. Por promedio configuracional se refiere a cualquier proceso que suaviza todas las variaciones espaciales abruptas a una longitud más pequeña que la longitud de onda dada. En la aproximación de campo medio, cuando se resuelve el conjunto de ecuaciones en Ec. (1.143), se desprecian las fluctuaciones $\Delta \vec{p}_i$. Entonces, bajo la aproximación de campo medio se tiene que

$$\vec{p}_i = \epsilon_1 \alpha_{pol} \left[\vec{E}^{\text{ext}} + \sum_{j=1}^N \bar{U}_{ij} \cdot \langle \vec{p} \rangle \right]. \quad (1.150)$$

Calculando el promedio configuracional de la Ec. (1.150), se obtiene

$$\langle \vec{p} \rangle = \epsilon_1 \alpha_{pol} \left[\vec{E}^{\text{ext}} + \left\langle \sum_{j=1}^N \bar{U}_{ij} \right\rangle \cdot \langle \vec{p} \rangle \right]. \quad (1.151)$$

Aislando el término de la auto imagen en la Ec. (1.151) se tiene

$$\langle \vec{p} \rangle = \epsilon_1 \alpha_{pol} \left[\vec{E}^{\text{ext}} + \left(\left\langle \sum_{j=1, j \neq i}^N \bar{U}_{ij} \right\rangle + \bar{U}_{ii}^I \right) \cdot \langle \vec{p} \rangle \right], \quad (1.152)$$

y considerando un promedio configuracional de ensamble (ver Apéndice de la Ref. [16]), se obtiene que

$$\left\langle \sum_{j=1, j \neq i}^N \bar{U}_{ij} \right\rangle = \frac{N}{V} \int \bar{U}(\vec{R}) g(\vec{R}) d^3 R, \quad (1.153)$$

donde V denota el volumen del sistema y $g(\vec{R})$ es la función de correlación de pares. En particular se elige la correlación de agujero [16] (correlación de esfera dura) de dos partículas. Se asume que dada una partícula de radio R localizada en el origen, $g(\vec{R})$ se interpreta como proporcional a la probabilidad de encontrar otra partícula a una distancia R . $g(\vec{R})$ está dada como

$$g(\vec{R}) = \begin{cases} 0 & r < 2a \\ 1 & r \geq 2a \end{cases}.$$

Utilizando la suposición de que en promedio el sistema es homogéneo e isotrópo, $g(\vec{R})$ depende

sólo de la distancia R entre partículas. Entonces, la ecuación para $\langle \vec{p}_i \rangle$ queda como

$$\langle \vec{p} \rangle = \epsilon_1 \alpha_{pol} \left[\vec{E}^{ext} + \left(\frac{N}{V} \int \bar{U}(\vec{R}) g(R) d^3 R + \bar{U}_{ii}^I \right) \cdot \langle \vec{p} \rangle \right]. \quad (1.154)$$

Dado que el campo de polarización está relacionado con $\langle \vec{p} \rangle$ por medio de la relación

$$\vec{P} = \frac{N}{V} \langle \vec{p} \rangle, \quad (1.155)$$

la ecuación a resolver para \vec{P} tiene la siguiente forma

$$\vec{P} = \epsilon_1 \alpha_{pol} \frac{N}{V} \left[\vec{E}^{ext} + \left(\int \bar{U}(\vec{R}) g(R) d^3 R + \frac{V}{N} \bar{U}_{ii}^I \right) \cdot \vec{P} \right], \quad (1.156)$$

donde

$$\bar{U}(\vec{R}) = \bar{U}^d(\vec{R}) + \bar{U}^I(\vec{R}), \quad (1.157)$$

con

$$\bar{U}^d = \frac{3\hat{R}\hat{R} - \bar{1}}{4\pi\epsilon_1 R^3} \quad \text{y} \quad \bar{U}^I = \frac{3\hat{R}^I \hat{R}^I - \bar{1}}{4\pi\epsilon_1 R^3} \cdot \bar{M}, \quad (1.158)$$

con \bar{M} dada por la Ec. (1.148). Dado que \vec{R} es un vector en el plano $z = a$ y $\vec{R}^I = \vec{R} + 2a\hat{e}_z$, las integrales de $d^3 R$ sobre el volumen V del sistema se puede escribir como

$$\int_V \bar{U}(\vec{R}) g(R) d^3 R \quad \rightarrow \quad 2a \int_S \bar{U}(\vec{R}) g(R) d^2 R, \quad (1.159)$$

donde $V = 2aS$, con S el área de la monocapa. Proyectando a lo largo de los ejes \hat{x} y \hat{z} (ver Fig. 1.5), se obtiene

$$P_x = \alpha_{pol} \frac{N}{V} \left[\epsilon_1 E_x^{ext} + \left(2a\epsilon_1 \int_S U^{dxx}(R) g(R) d^2 R + 2a\epsilon_1 \int_S U^{Ixx}(R) g(R) d^2 R + \frac{V}{N} \epsilon_1 U_{ii}^{Ixx}(R) \right) P_x \right], \quad (1.160)$$

$$P_z = \alpha_{pol} \frac{N}{V} \left[\epsilon_1 E_z^{ext} + \left(2a\epsilon_1 \int_S U^{dzz}(R) g(R) d^2 R + 2a\epsilon_1 \int_S U^{Izz}(R) g(R) d^2 R + \frac{V}{N} \epsilon_1 U_{ii}^{Izz}(R) \right) P_z \right], \quad (1.161)$$

con los siguientes elementos de matriz

$$U^{dxx}(R) = \frac{3 \cos^2 \varphi - 1}{4\pi\epsilon_1 R^3}, \quad U^{Ixx}(R) = -A \frac{R^2(3 \cos^2 \varphi - 1) - 4a^2}{4\pi\epsilon_1 (R^2 + 4a^2)^{5/2}}, \quad (1.162)$$

y

$$U^{dzz}(R) = \frac{-1}{4\pi\epsilon_1 R^3}, \quad U^{Izz}(R) = A \frac{8a^2 - R^2}{4\pi\epsilon_1 (R^2 + 4a^2)^{5/2}}, \quad (1.163)$$

donde φ es el ángulo entre el vector \vec{R} y el eje \hat{z} , y

$$A = \frac{\epsilon_3 - \epsilon_1}{\epsilon_3 + \epsilon_1},$$

es el factor de imagen. Sustituyendo los elementos de matriz, Ecs. (1.162) y (1.163), en las Ecs.

(1.160) y Ec. (1.161), se pueden resolver las integrales de la siguiente forma

$$2a\epsilon_1 \int_S U^{dxx}(R)g(R)d^2R = \frac{2a}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi (3\cos^2\varphi - 1) \int_0^\infty \frac{g(R)}{R^3} R dR = \frac{a}{2} \int_0^\infty \frac{g(R)}{R^2} dR, \quad (1.164)$$

$$\begin{aligned} 2a\epsilon_1 \int_S U^{Ixx}(R)g(R)d^2R &= -A \frac{2a}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi [(3\cos^2\varphi - 1)R^2 - 4a^2] \int_0^\infty g(R) \frac{R dR}{(R^2 + 4a^2)^{5/2}} \\ &= -A \frac{a}{2} \int_0^\infty g(R) \frac{R(R^2 - 8a^2)}{(R^2 + 4a^2)^{5/2}} dR, \end{aligned} \quad (1.165)$$

$$2a\epsilon_1 \int_S U^{dzz}(R)g(R)d^2R = -\frac{2a}{4\pi} 2\pi \int_0^\infty \frac{g(R)}{R^3} R dR = a \int_0^\infty \frac{g(R)}{R^2} dR, \quad (1.166)$$

$$2a\epsilon_1 \int_S U^{Izz}(R)g(R)d^2R = Aa \int_0^\infty g(R) \frac{R(8a^2 - R^2)}{(R^2 + 4a^2)^{5/2}} dR, \quad (1.167)$$

por lo que es posible expresar el resultado en términos de únicamente dos integrales, después de un cambio de variable $R = 2ax$:

$$g \equiv 2a \int_0^\infty \frac{g(R)}{R^2} dR \equiv \int_0^\infty \frac{g(2ax)}{x^2} dx, \quad (1.168)$$

$$g^I \equiv 2a \int_0^\infty g(R) \frac{R(8a^2 - R^2)}{(R^2 + 4a^2)^{5/2}} dR = \int_0^\infty g(2ax) \frac{x(x^2 - 2)}{(x^2 + 1)^{5/2}} dx. \quad (1.169)$$

Los términos que involucran las auto imágenes pueden escribirse como

$$\epsilon_1 U_{ii}^{Ixx} = \frac{A}{4\pi(2a)^3} \quad \text{y} \quad \epsilon_1 U_{ii}^{Izz} = \frac{2A}{4\pi(2a)^3}, \quad (1.170)$$

y por la Ec. (1.144) se tiene

$$\alpha_{pol} \frac{N}{V} = 4\pi a^3 \frac{(\epsilon_s - \epsilon_1)}{(\epsilon_s + 2\epsilon_1)} \frac{N}{2aS} = 2\Theta \tilde{\alpha}_{pol}, \quad (1.171)$$

donde $\Theta = N\pi a^2/S$ es la fracción de cubierta y

$$\tilde{\alpha}_{pol} = \frac{(\epsilon_s - \epsilon_1)}{(\epsilon_s + 2\epsilon_1)},$$

es la polarizabilidad adimensional.

A partir de las componentes P_x y P_z , Ecs. (1.160) y (1.161), se pueden expresar como

$$P_x = 2\Theta \tilde{\alpha}_{pol} \epsilon_1 E_x^{\text{ext}} + \left[\frac{\Theta \tilde{\alpha}_{pol}}{2} (g - Ag^I) + A \frac{\tilde{\alpha}_{pol}}{8} \right] P_x, \quad (1.172)$$

$$P_z = 2\Theta \tilde{\alpha}_{pol} \epsilon_1 E_z^{\text{ext}} - \left[\Theta \tilde{\alpha}_{pol} (g + Ag^I) - A \frac{\tilde{\alpha}_{pol}}{4} \right] P_z, \quad (1.173)$$

y resolviendo para P_x y P_z se obtiene que

$$P_x = \frac{2\Theta\tilde{\alpha}_{pol}}{1 - A\frac{\tilde{\alpha}_{pol}}{8} - \frac{\Theta\tilde{\alpha}_{pol}}{2}(g - Ag^I)} \epsilon_1 E_x^{ext}, \quad (1.174)$$

$$P_z = \frac{2\Theta\tilde{\alpha}_{pol}}{1 - A\frac{\tilde{\alpha}_{pol}}{4} + \Theta\tilde{\alpha}_{pol}(g + Ag^I)} \epsilon_1 E_z^{ext}. \quad (1.175)$$

Sustituyendo estos resultados en las Ecs. (1.141) y (1.142), y dado que $g = 1$ y $g^I = \sqrt{2}/4$ [16] se obtiene finalmente que

$$\frac{\epsilon_2^{\parallel}}{\epsilon_1} = 1 + \frac{2\Theta\tilde{\alpha}_{pol}}{1 - A\frac{\tilde{\alpha}_{pol}}{8} - \frac{\Theta\tilde{\alpha}_{pol}}{2}(1 - A\frac{\sqrt{2}}{4})}, \quad (1.176)$$

y

$$\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2^{\perp}} = 1 - \frac{2\Theta\tilde{\alpha}_{pol}}{1 - A\frac{\tilde{\alpha}_{pol}}{4} + \Theta\tilde{\alpha}_{pol}(1 + A\frac{\sqrt{2}}{4})}. \quad (1.177)$$

Con el modelo teórico anteriormente descrito, en este trabajo de tesis se calcula la permitividad efectiva de la monocapa de aluminio desordenada soportada sobre un sustrato de cuarzo, embebida en vacío e iluminada en una configuración de incidencia externa. Los parámetros relevantes del problema son: el radio de las partículas a , la fracción de cubierta Θ , las permitividades eléctricas de los 3 medios, la polarización del haz incidente y el ángulo de incidencia.

1.4. Función dieléctrica

Para una nanopartícula con un diámetro menor a 10 nm, se sabe que la función dieléctrica no tiene el mismo valor que la función dieléctrica de bulto y además es dependiente del radio a de la partícula, esto es [17]

$$\epsilon = \epsilon(\omega, a).$$

Se ha mostrado que es necesario hacer una corrección a la función dieléctrica del material para describir adecuadamente las propiedades ópticas de estas partículas [17]. Conforme el tamaño de la partícula incrementa, los efectos de la corrección de tamaño se vuelven despreciables.

Para explicar las propiedades ópticas en los metales, en particular en el aluminio, usualmente se emplean los modelos de Drude y Lorentz.

1.4.1. Modelo de Drude

Las propiedades ópticas de los metales pueden ser explicadas a partir de un modelo de plasma [8], donde un gas de electrones compuesto por n electrones se mueve a través de un fondo electromagnético causado por núcleos de iones positivos. En el modelo de plasma, los

detalles del potencial de la red y las interacciones electrón-electrón no son tomadas en cuenta. Los electrones responden a un campo electromagnético externo y su movimiento es atenuado debido a colisiones que ocurren con una frecuencia característica de colisión $\gamma = 1/\tau$, donde τ es el tiempo de relajación del gas de electrones libres.

La ecuación de movimiento de un electron libre del mar de plasma sujeto a un campo eléctrico externo $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$ es

$$m_e \frac{\partial^2 \vec{x}}{\partial t^2} + m_e \gamma \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = -e \vec{E}_0 e^{-i\omega t}. \quad (1.178)$$

La Ec. (1.178) asume que la fuerza externa es una perturbación armónica en el tiempo, por lo tanto se propone como solución el *ansatz* $\vec{x}(t) = \vec{x}_0 e^{-i\omega t}$. Sustituyendo $\vec{x}(t)$ en la Ec. (1.178) se tiene

$$\begin{aligned} m_e \vec{x}_0 \frac{\partial^2 e^{-i\omega t}}{\partial t^2} + m_e \gamma \vec{x}_0 \frac{\partial e^{-i\omega t}}{\partial t} &= -e \vec{E}_0 e^{-i\omega t}, \\ -\omega^2 m_e \vec{x}_0 e^{-i\omega t} + (-i\omega) m_e \gamma \vec{x}_0 e^{-i\omega t} &= -e \vec{E}_0 e^{-i\omega t}, \\ -\omega^2 m_e \vec{x}_0 e^{-i\omega t} - i\omega m_e \gamma \vec{x}_0 e^{-i\omega t} &= -e \vec{E}_0 e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

Dado que $\vec{x}(t) = \vec{x}_0 e^{-i\omega t}$ y $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$, entonces

$$-\omega^2 m_e \vec{x}(t) - i\omega m_e \gamma \vec{x}(t) = -e \vec{E}(t).$$

Despejando $\vec{x}(t)$ se tiene que

$$\vec{x}(t) = \frac{e}{m_e(\omega^2 + i\omega\gamma)} \vec{E}(t). \quad (1.179)$$

Los electrones desplazados contribuyen a la polarización macroscópica $\vec{P} = -ne\vec{x}$, entonces

$$\vec{P}(t) = -\frac{ne^2}{m_e(\omega^2 + i\omega\gamma)} \vec{E}(t). \quad (1.180)$$

Sustituyendo \vec{P} en la definición del vector de desplazamiento eléctrico $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$ se obtiene

$$\vec{D}(t) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}\right) \vec{E}(t). \quad (1.181)$$

donde $\omega_p = ne^2/\epsilon_0 m_e$ es la frecuencia de plasma del gas de electrones libres [8]. De la relación constitutiva $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ se obtiene la función dieléctrica del gas de electrones, dada por

$$\epsilon_{\text{Drude}}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}. \quad (1.182)$$

De esta forma se tiene $\epsilon(\omega) = \text{Re}[\epsilon(\omega)] + \text{Im}[\epsilon(\omega)]$, donde

$$\text{Re}[\epsilon(\omega)] = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \gamma^2} \quad (1.183)$$

y

$$\text{Im}[\epsilon(\omega)] = \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega(\omega^2 - \gamma^2)}. \quad (1.184)$$

Para determinar los valores de la frecuencia de plasma ω_p y la constante de amortiguamiento γ del aluminio se utilizó el método propuesto por Mendoza Herrera et al. [18] que determina el rango espectral en el que el material es descrito con el modelo de Drude. Este método retira la restricción usual [19] de considerar sólo aquellas frecuencias para las cuales se cumple que $\omega \gg \gamma$ y permite distinguir las regiones en donde la función dieléctrica presenta transiciones intrabanda e interbanda. En las transiciones intrabanda, la respuesta óptica del material es dominada por la contribución de los electrones libres, mientras que en las transiciones interbanda la respuesta óptica es dominada por la contribución de los electrones ligados, que en el modelo de Drude no aparecen. A partir de los datos experimentales de la función dieléctrica del aluminio en función de

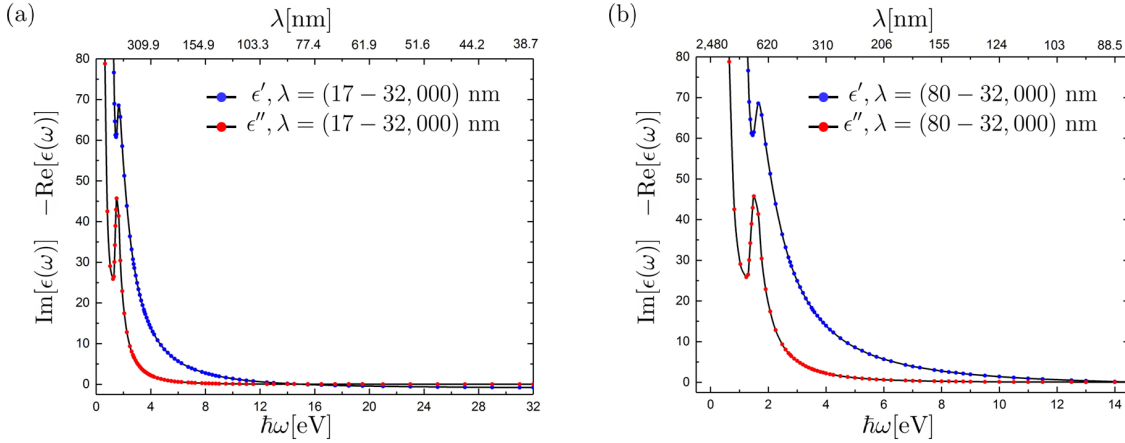


Fig. 1.6: (a) Función dieléctrica del aluminio obtenidos de Palik [20]. Los puntos azules y rojos corresponden a las partes real e imaginaria de los datos reportados por Shiles et al., de 0.03875 - 40 eV. (b) Ampliación de (a) en la región de 0.03875 a 14 eV.

la energía obtenidos por Shiles et al. [20], ver Fig. 1.6, se calculan los valores de ω_p y γ utilizando las siguientes relaciones

$$\omega \text{Im}[\epsilon(\omega)] = \gamma(1 - \text{Re}[\epsilon(\omega)]), \quad (1.185)$$

$$\omega^2 \{ \text{Im}[\epsilon(\omega)]^2 + (1 - \text{Re}[\epsilon(\omega)])^2 \} = \omega_p^2 (1 - \text{Re}[\epsilon(\omega)]), \quad (1.186)$$

donde los valores de $\text{Re}[\epsilon]$ y $\text{Im}[\epsilon]$ están dados por las Ecs. (1.183) y (1.184), respectivamente. A partir de las Ecs. (1.185) y (1.186), y usando la función dieléctrica de Shiles et al. [20], se obtiene la Fig. 1.7, que muestra los ajustes lineales con ordenada al origen entre las variables $\gamma(1 - \text{Im}[\epsilon])$

y $\hbar\omega\text{Im}[\epsilon]$, Ec. (1.185), así como las variables $\omega_p^2(1 - \text{Re}[\epsilon])$ y $\hbar^2\omega^2\{\text{Im}[\epsilon]^2 + (1 - \text{Re}[\epsilon])^2\}$, Ec. (1.186), que relacionan tanto a la frecuencia de plasma ω_p como a la constante de amortiguamiento γ con la función dieléctrica del aluminio. Los valores obtenidos de las pendientes de los ajustes lineales con ordenada al origen son: $\hbar\omega_p = (15.60 \pm 0.001) \text{ eV}$ y $\hbar\gamma = (0.59 \pm 0.002) \text{ eV}$. Estos valores corresponden al mejor ajuste lineal en el intervalo de (4 – 12) eV. Fuera del intervalo (4 – 12) eV, los datos obtenidos por Shiles et al., dejan de cumplir ser el mejor ajuste lineal con ordenada al origen dado por las Ecs. (1.185) y (1.186). La longitud de onda mínima para ambos ajustes lineales es $\lambda = 99.2 \text{ nm}$ y la mayor es $\lambda = 400 \text{ nm}$, que corresponden a un intervalo en la variable $(1 - \text{Re}[\epsilon])$, $\Delta = (1.48 - 25.0)$, ver Fig 1.7. Los datos en círculos negros (ajuste línea roja) corresponden a la Ec. (1.185) y los círculos rojos (ajuste línea negra) a la Ec. (1.186).

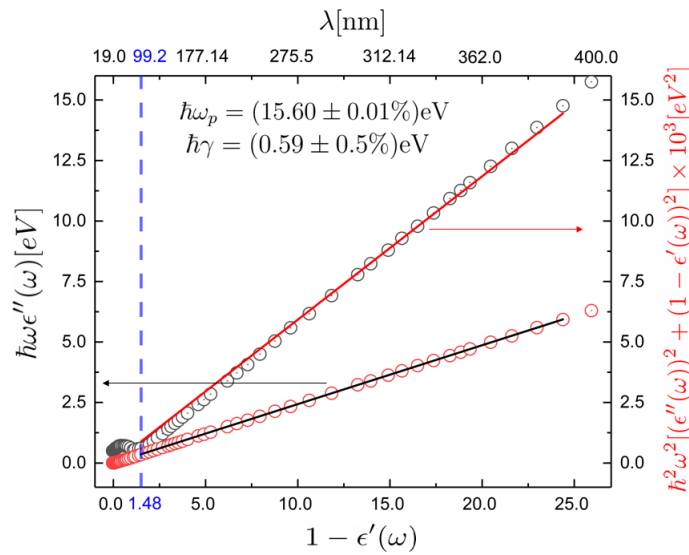


Fig. 1.7: Determinación de $\hbar\omega_p$ y $\hbar\gamma$ para el aluminio, a partir de las Ecs. (1.185) y (1.186), respectivamente, para los datos experimentales de la función dieléctrica obtenida por Shiles et al. [20]. Los datos en círculos negros (ajuste línea roja) corresponden a la Ec. (1.185) y los círculos rojos (ajuste línea negra) a la Ec. (1.186). La línea punteada azul muestra la división entre los regímenes lineal y no lineal, que en ambos casos se encuentra en $\lambda = 99.2 \text{ nm}$.

Dentro del intervalo $\Delta\lambda = (99.2 - 400) \text{ nm}$ la contribución dominante es la de los electrones libres, descrita por el modelo de Drude. Fuera del intervalo $\Delta\lambda$, la contribución de los electrones ligados no es despreciable.

1.4.2. Corrección por tamaño

En el marco de la teoría clásica del electromagnetismo, la constante de amortiguamiento γ de la Ec. (1.182) para un material en bulto está constituida por contribuciones γ_i debido a la interacción de los electrones con los fonones, electrones, impurezas y defectos de la red⁸: $\gamma = \sum \gamma_i$. Si se considera que las interacciones del electrón son elásticas, los electrones cercanos a la superficie de Fermi [21] son los que contribuyen en mayor medida a la respuesta óptica del material, de

aquí que

$$\gamma = \frac{\nu_F}{l_\infty}, \quad (1.187)$$

donde ν_F es la velocidad de Fermi y l_∞ es la longitud del camino medio libre de los electrones. A partir de los valores obtenidos para γ del aluminio de la Ec. (1.185) y considerando que la velocidad de Fermi del aluminio es $\nu_F = 2.02 \times 10^{15}$ nm/s [21], entonces $l_\infty = 18.9$ nm. Si el tamaño de las partículas metálicas es comparable o menor que l_∞ , los procesos de esparcimiento de luz se modifican con respecto al aluminio en bulto. La contribución adicional a γ , $\Delta\gamma(a)$ es proporcional a $1/a$ [17]. Sustituyendo en la función dieléctrica de Drude [Ec. (1.182)] el valor de γ por $\gamma(a)$, con

$$\gamma(a) = \gamma + \Delta\gamma(a) \quad \text{y} \quad \Delta\gamma(a) = A \frac{\nu_F}{a}, \quad (1.188)$$

donde A es conocida como la constante de metal, entonces

$$\epsilon_{CT}(\omega, a) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma + i\omega\Delta\gamma(a)}, \quad (1.189)$$

es la expresión de la función dieléctrica de Drude $\epsilon_{CT}(\omega, a)$ con corrección por tamaño. Para calcular la función *dieléctrica total* se utiliza la expresión dada por [17]

$$\epsilon_{Tot}(\omega, a) = \epsilon_{bulto}(\omega) - \epsilon_{Drude}(\omega) + \epsilon_{CT}(\omega, a). \quad (1.190)$$

Sustituyendo las Ecs. (1.182) y (1.189) en la Ec. (1.190), se obtiene

$$\epsilon_{Tot}(\omega, a) = \epsilon_{bulto}(\omega) - \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}\right) + \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma + i\omega\Delta\gamma(a)}\right),$$

o bien

$$\epsilon_{Tot}(\omega, a) = \epsilon_{bulto}(\omega) + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma + i\omega\Delta\gamma(a)}. \quad (1.191)$$

La expresión, $\epsilon_{Tot}(\omega, a)$, Ec. (1.191), contiene información de la función dieléctrica de bulto, la cual a su vez tiene la contribución de los electrones libres y electrones ligados en el material. Al restar $\epsilon_{Drude}(\omega)$ y sumar $\epsilon_{CT}(\omega)$ a la función de bulto se obtiene una función que contempla la contribución dada por los electrones en el modelo de Drude considerando la corrección por tamaño en el intervalo de longitud de onda $\Delta\lambda = (72 - 400)$ nm. En la expresión total, Ec. (1.191), la contribución de los electrones ligados no se modifica por tamaño ya que la contribución dominante de los mecanismos de disipación de energía en el intervalo $\Delta\lambda = (72 - 400)$ nm se debe mayormente a los electrones libres del material y no a los electrones ligados [18].

⁸ $\sum \gamma_i = \gamma_{\text{defectos puntuales}} + \gamma_{\text{dislocaciones}} + \gamma_{\text{límites de grano}} + \gamma_{\text{e-fonones}} + \gamma_{\text{e-e}}$ [18]

Constante de metal A

La Ec. (1.191) puede ser reescrita considerando la Ec. (1.188) de la siguiente forma

$$\epsilon_{\text{Tot}}(\omega, a, A) = \epsilon_{\text{bulto}}(\omega) + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma + i\omega A \frac{\nu_F}{a}}. \quad (1.192)$$

En el caso del aluminio $\hbar\omega_p = (15.60 \pm 0.001)$ eV y $\hbar\gamma = (0.59 \pm 0.002)$ eV, y la velocidad de Fermi del aluminio es $\nu_F = 2.02 \times 10^{15}$ nm/s. La información sobre la variable denominada constante de metal A da cuenta sobre los mecanismos de disipación del material y es distinta en diversos materiales [17]. La Fig. 1.8 muestra la dependencia de la constante de amortiguamiento $\gamma(a)$ en función de la constante de metal A , para diversos radios de nanopartículas de aluminio.

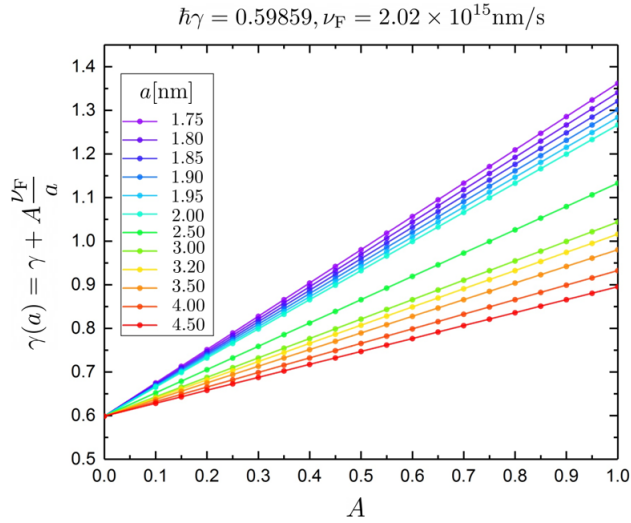


Fig. 1.8: Constante de amortiguamiento dependiente del radio a de la partícula, de la constante de metal A y de la velocidad de Fermi del material ν_F . El intervalo para el radio es $\Delta a = (1.75 - 4.5)$ nm.

En la Fig. 1.8, se observa que para un valor fijo de A , la constante de amortiguamiento $\gamma(a)$ toma valores mayores en su pendiente para radios menores. Esto indica que los mecanismos de disipación se vuelven más importantes cuando el radio de la partícula disminuye. En la Fig. 1.9 se compara la función dieléctrica total en función de la energía para distintos valores de la constante de metal: $A = 0.5$, $A = 0.7$, $A = 0.8$. En la Fig. 1.9, los datos en color negro corresponden a la función dieléctrica de bulto para el aluminio [20], los datos en color magenta, azul y rojo corresponden respectivamente a las funciones dieléctricas modificadas por tamaño para los radios $a = 4.65$ nm, $a = 3.2$ nm y $a = 1.75$ nm. Para estos valores de A en el intervalo energético menor a 1 eV, la parte imaginaria de la función dieléctrica modificada por tamaño tiene valores menores que la función dieléctrica de bulto. Por otro lado, la parte real de la función dieléctrica es negativa para valores menores a $\hbar\omega_p = (15.60 \pm 0.001)$ eV. En este intervalo energético por debajo de $\hbar\omega_p$, la luz es reflejada eficientemente por el aluminio. La parte real de la función dieléctrica modificada por tamaño toma valores mayores a la función dieléctrica de bulto en todo el intervalo. Esto se debe a que hay mayor absorción y por lo tanto menor reflexión de la luz con respecto al

1.4 Función dieléctrica

aluminio de bulto. Conforme el tamaño de la partícula aumenta, la función dieléctrica modificada se aproxima a la función dieléctrica de bulto.

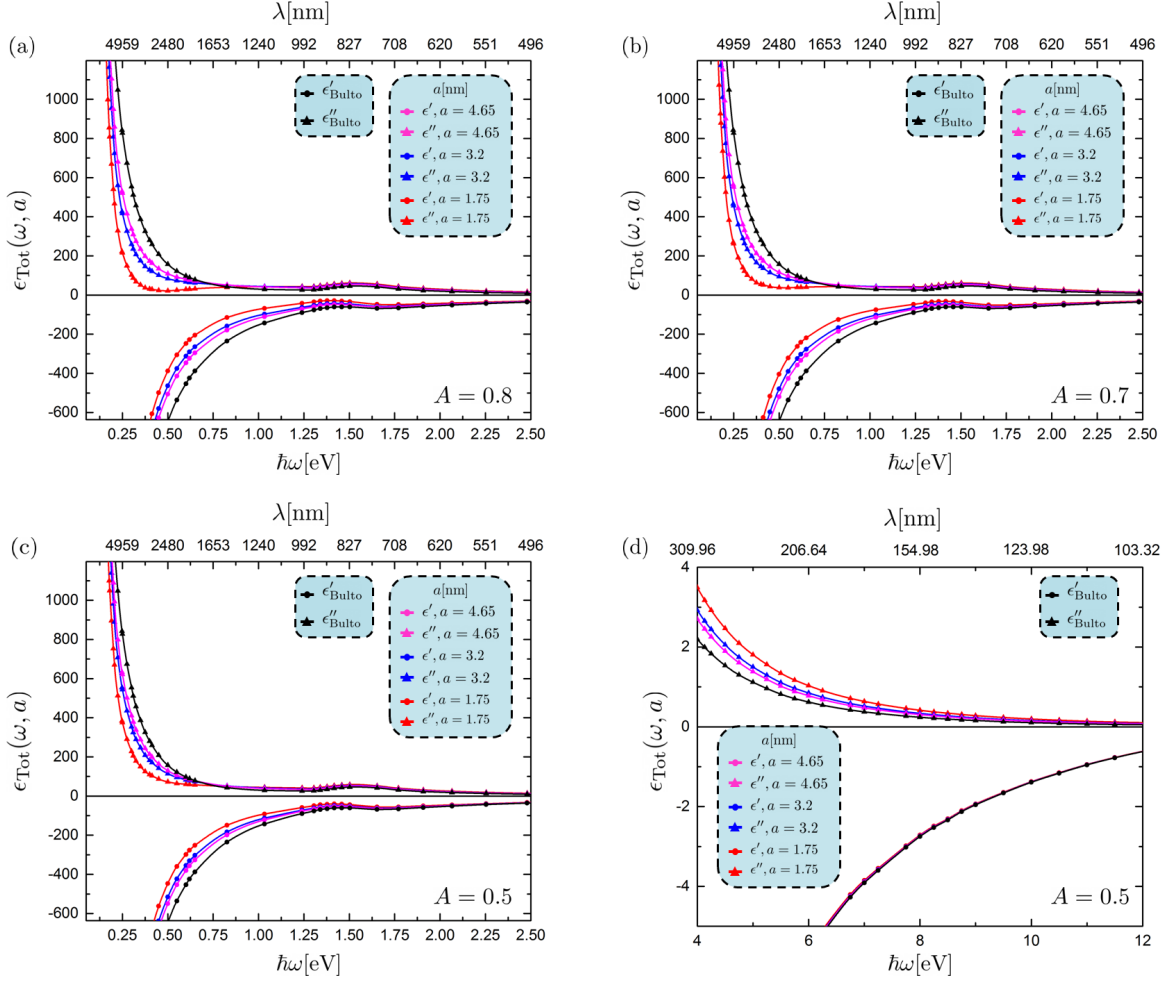


Fig. 1.9: Función dieléctrica modificada por tamaño para una constante de metal (a) $A = 0.8$, (b) $A = 0.7$ y (c) $A = 0.5$. Línea negra: datos experimentales del aluminio en bulto, líneas magenta, azul y rojo: funciones dieléctricas corregidas por tamaño para radios $a = 4.65, 3.2, 1.75$ nm, respectivamente. (d) Función dieléctrica modificada por tamaño para una constante de metal (c) $A = 0.5$ en el intervalo $\Delta E = (4 - 12)$ eV.

La Fig. 1.9(d) muestra los datos experimentales en el intervalo energético $\Delta E = (4 - 12)$ eV. Dentro de este intervalo se encuentra el intervalo de longitudes de onda $\Delta\lambda = (72 - 400)$ nm en donde el aluminio es descrito por el modelo de Drude para una constante de metal $A = 0.5$. En este intervalo, el valor de la parte real de la función dieléctrica modificada por tamaño difiere un poco de la función dieléctrica de bulto.

1.5. Reflectancia, transmitancia, absorción y absorbancia

El sistema de estudio de esta tesis de licenciatura consiste en una monocapa de nanopartículas idénticas de aluminio esféricas depositadas al azar sobre un sustrato de cuarzo, ver Fig. 1.10(a). La monocapa es iluminada en configuración de incidencia externa a un ángulo $\theta_i = 0^\circ$,

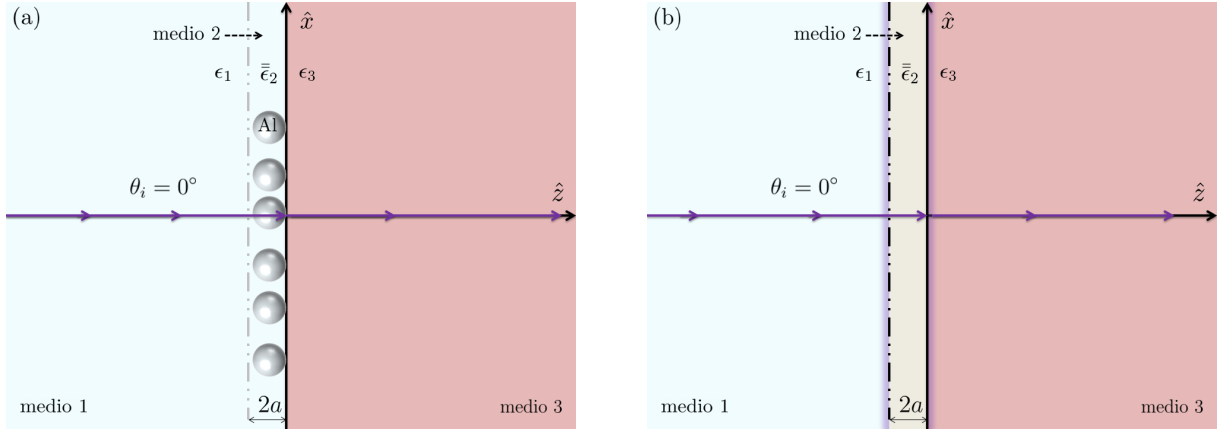


Fig. 1.10: (a) Monocapa de nanopartículas esféricas idénticas de aluminio de radio a y permitividad eléctrica $\epsilon_s(\omega)$, localizadas aleatoriamente sobre un sustrato con permitividad ϵ_3 . Las esferas están embebidas en un medio con permitividad eléctrica ϵ_1 y la onda incide a un ángulo $\theta_i = 0^\circ$ desde el medio con ϵ_1 , y $\epsilon_1 < \epsilon_3$. (b) Sistema multicapa que representa la descripción dada por el modelo dipolar en donde el medio 2 es sustituido por una película de ancho $2a$, caracterizado por una función dieléctrica efectiva $\bar{\epsilon}_2$.

incidencia normal. Con el formalismo de matriz de transferencia descrito en la Sec. 1.2.1, se obtuvieron expresiones para los coeficientes de reflexión [Ecs. (1.122) y (1.125)] y transmisión, [Ecs. (1.130) y (1.133)] en polarización s y p , respectivamente, de un sistema monocapa como el mostrado en la Fig. 1.10, dados por

$$r_{123}^{(s)} = \frac{r_{12}^{(s)} + r_{23}^{(s)} e^{2i\beta}}{1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} e^{2i\beta}} \quad \text{y} \quad r_{123}^{(p)} = \frac{r_{12}^{(p)} + r_{23}^{(p)} e^{2i\beta}}{1 + r_{12}^{(p)} r_{23}^{(p)} e^{2i\beta}},$$

$$t_{123}^{(s)} = \frac{t_{12}^{(s)} t_{23}^{(s)} e^{i\beta}}{1 + r_{12}^{(s)} r_{23}^{(s)} e^{2i\beta}} \quad \text{y} \quad t_{123}^{(p)} = \frac{t_{12}^{(p)} t_{23}^{(p)} e^{i\beta}}{1 + r_{12}^{(p)} r_{23}^{(p)} e^{2i\beta}}.$$

En la Fig. 1.10(a), el medio 1 es aire caracterizado por una función dieléctrica ϵ_1 y el medio 2, que corresponde a la función dieléctrica efectiva $\bar{\epsilon}_2$ de la monocapa de partículas metálicas embebidas en aire, que se obtiene a partir del modelo dipolar, ver Ecs. (1.176) y (1.177) de la Sec. 1.3, y el medio 3 es cuarzo (SiO_2) con una función dieléctrica ϵ_3 .

Como se mencionó en la sección 1.4.2, las propiedades ópticas de las partículas metálicas se modifican cuando sus dimensiones son comparables o menores a la longitud de camino medio l_∞ de los electrones [17]. Las partículas metálicas de aluminio depositadas al azar sobre el sustrato de cuarzo son menores a 10 nm, están caracterizadas por la función dieléctrica ϵ_{Tot} . Al utilizar el modelo dipolar, se considera que la monocapa de partículas de aluminio puede ser sustituida por una película homogénea con función dieléctrica ϵ_{Tot} , ver Fig. 1.10(b).

Debido a que el sistema monocapa absorbe energía, la suma de la reflectancia y la transmitancia

[Ec. (1.110)] cumple que

$$\mathcal{R} + \mathcal{T} + \mathcal{A} = 1, \quad (1.193)$$

donde \mathcal{A} es la *absorción* del sistema, y se calcula a partir de la reflectancia y transmitancia dervidas en la Sec. 1.2.1. Experimentalmente, para medir la cantidad de luz que no se transmite en el sistema, se utiliza la relación

$$\mathcal{A}' = -\log_{10}(\mathcal{T}), \quad (1.194)$$

donde \mathcal{A}' es la *absorbancia* del sistema. La absorbancia es una medida logarítmica de la transmitancia. Mientras más energía sea absorbida y extinguida por la monocapa, en la dirección $\theta_i = 0^\circ$, menos luz es transmitida. La Ec. (1.194) representa una ventaja experimental en mediciones de laboratorio ya que sólo es necesario medir la luz transmitida por el sistema para obtener información de la absorción y extinción de la luz a diferencia de la Ec.(1.193), donde además de tener que medir la luz transmitida, también es necesario medir la luz reflejada por el sistema.

1.6. Teoría de Mie

La respuesta óptica de una partícula esférica aislada en presencia de un campo electromagnético incidente está dada a partir de características específicas como: la cantidad y distribución angular de la luz esparcida por la partícula, y la cantidad de luz absorbida por la misma [22]. Estas cantidades dependen del tamaño de la partícula, de su forma y del material del cual está compuesto, así como las características de la luz incidente. La teoría de Mie, también llamada teoría de Lorentz-Mie o teoría de Lorentz-Mie-Debye, es una solución analítica a las ecuaciones de Maxwell para el esparcimiento de la radiación electromagnética por una partícula esférica. Considerando una onda electromagnética monocromática plana que ilumina una partícula de un tamaño específico, se puede calcular el campo electromagnético en todos los puntos, tanto dentro como fuera de la partícula esférica, expandiendo la onda plana electromagnética incidente en la base de armónicos esféricos vectoriales, cuyos elementos satisfacen las ecuaciones de Maxwell. Entonces se proponen soluciones para los campos eléctrico y magnético, tanto dentro como fuera de la esfera, en términos de la base esférica cuyos coeficientes de expansión, conocidos como coeficientes de Mie, se determinan al aplicar condiciones de frontera adecuadas a los campos electromagnéticos sobre la superficie de la partícula.

Para calcular los campos electromagnéticos esparcidos por una partícula esférica embebida en un medio con índice de refracción N , se considera una onda electromagnética plana y armónica con longitud de onda λ , que se propaga en la dirección \hat{z} , (ver Fig. 1.11), y que incide sobre la partícula con centro en el origen de coordenadas O . Análogo al plano de incidencia, se define el *plano de esparcimiento* como el plano generado por la dirección de propagación del campo electromagnético esparcido y la dirección de propagación de la onda incidente, eje \hat{z} . Es conveniente expresar la onda electromagnética plana incidente en términos de las componentes del campo eléctrico paralelo $E_{\parallel i}$ y perpendicular $E_{\perp i}$ al plano de esparcimiento, así como los vectores unitarios paralelo $\hat{e}_{\parallel i}$ y

perpendicular $\hat{e}_{\perp i}$ al plano de esparcimiento (ver Fig. 1.11), de tal forma que

$$\vec{E}_i = (E_{0\parallel}\hat{e}_{\parallel i} + E_{0\perp}\hat{e}_{\perp i})e^{(ikz-i\omega t)} = E_{\parallel i}\hat{e}_{\parallel i} + E_{\perp i}\hat{e}_{\perp i}, \quad (1.195)$$

donde $k = 2\pi N/\lambda$ es el número de onda asociado al medio que rodea la partícula, N es el índice de refracción correspondiente a este medio (la matriz), λ es la longitud de onda de la onda electromagnética incidente en el vacío y ω su frecuencia angular.

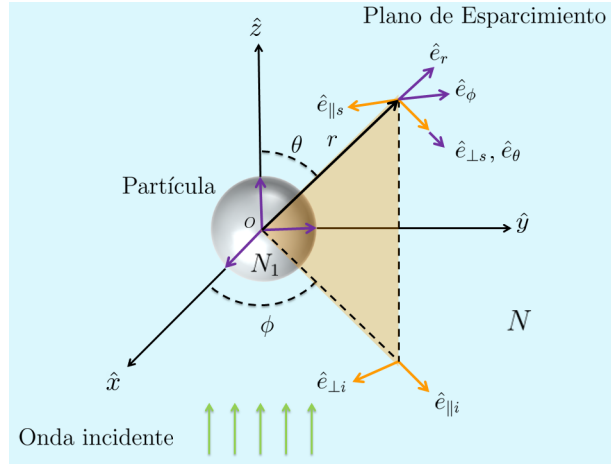


Fig. 1.11: Una onda electromagnética plana y armónica con longitud de onda λ , que se propaga en dirección \hat{z} , incide sobre una partícula esférica con centro en el origen de coordenadas O .

Los vectores ortonormales $\hat{e}_{\parallel i}$ y $\hat{e}_{\perp i}$ en términos de la base cartesiana se escriben como

$$\hat{e}_{\parallel i} = \cos \phi \hat{x} + \sin \phi \hat{y} \quad \text{y} \quad \hat{e}_{\perp i} = \sin \phi \hat{x} - \cos \phi \hat{y},$$

cumpliendo que

$$\hat{e}_{\perp i} \times \hat{e}_{\parallel i} = \hat{z}.$$

En términos de la base esférica denotada por el sistema coordenado (r, θ, ϕ) se tiene

$$\hat{e}_{\perp i} = -\hat{\phi} \quad \text{y} \quad \hat{e}_{\parallel i} = \sin \theta \hat{r} + \cos \theta \hat{\theta}.$$

Denotando por E_{xi} y E_{yi} a las componentes x y y , respectivamente, de la onda incidente, entonces

$$\begin{aligned} E_{\parallel i} &= \cos \phi E_{xi} + \sin \phi E_{yi}, \\ E_{\perp i} &= \sin \phi E_{xi} - \cos \phi E_{yi}. \end{aligned}$$

Por otra parte, para distancias alejadas del origen O , el campo esparcido es transversal, es decir, $\hat{r} \cdot \vec{E}_s \simeq 0$. Por lo tanto, en la región de campo lejano el campo esparcido se puede escribir como

$$\vec{E}_s = E_{\parallel s}\hat{e}_{\parallel s} + E_{\perp s}\hat{e}_{\perp s}, \quad (1.196)$$

$$\hat{e}_{\parallel s} = \hat{\theta}, \quad \hat{e}_{\perp s} = \hat{\phi}, \quad \hat{e}_{\perp s} \times \hat{e}_{\parallel s} = \hat{r}.$$

Los vectores $\hat{e}_{\parallel s}$ y $\hat{e}_{\perp s}$ son los vectores paralelo y perpendicular al plano de esparcimiento, respectivamente. La relación entre el campo incidente y el campo esparcido se escribe en forma matricial como

$$\begin{bmatrix} E_{\parallel s} \\ E_{\perp s} \end{bmatrix} = \frac{e^{ikr}}{-ikr} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 \\ S_4 & S_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{\parallel i} \\ E_{\perp i} \end{bmatrix}, \quad (1.197)$$

donde los elementos $S_j (j = 1, 2, 3, 4)$ de la matriz de amplitud de esparcimiento son en general dependientes de los ángulos θ y ϕ . Cuando una onda electromagnética no polarizada incide sobre una partícula los campos esparcidos se polarizan, por lo que el esparcimiento es un mecanismo de polarización de la luz [22].

Solucion a las ecuaciones de onda vectoriales

Los campos eléctrico y magnético que inciden sobre la partícula cumplen la ecuación de onda

$$\nabla^2 \vec{E} + k^2 \vec{E} = 0, \quad \nabla^2 \vec{H} + k^2 \vec{H} = 0, \quad (1.198)$$

donde $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$. Se considera que el medio sobre el cual se propaga el campo electromagnético armónico incidente es lineal, homogéneo e isótropo y además es no absorbente. Por lo tanto, sus componentes son transversales a la dirección de propagación \hat{z} y los campos \vec{E} y \vec{H} están relacionados por las expresiones [14]

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0, \quad (1.199a)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0, \quad (1.199b)$$

$$\nabla \times \vec{E} = i\omega\mu\vec{H}, \quad (1.199c)$$

$$\nabla \times \vec{H} = -i\omega\epsilon\vec{E}. \quad (1.199d)$$

En la solución de Mie, se construyen los vectores \vec{M} y \vec{N} que satisfacen las propiedades matemáticas de un campo electromagnético, Ec. (1.198). La función vectorial \vec{M} se construye a partir de una función escalar ψ y un vector constante \vec{c} , mediante la relación

$$\vec{M} = \nabla \times (\vec{c}\psi),$$

y la función vectorial \vec{M} cumple que

$$\nabla \cdot \vec{M} = 0.$$

A partir de estas ecuaciones se tiene que

$$\nabla^2 \vec{M} + k^2 \vec{M} = \nabla \times [\vec{c}(\nabla^2 \psi + k^2 \psi)], \quad (1.200)$$

es decir, \vec{M} satisface la ecuación de onda vectorial si ψ es una solución de la ecuación de onda escalar

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0.$$

Además, el vector \vec{M} es siempre perpendicular al vector constante \vec{c} . También se construye otra función vectorial \vec{N} , tal que

$$\vec{N} = \frac{\nabla \times \vec{M}}{k}. \quad (1.201)$$

Análogo a \vec{M} , \vec{N} cumple que

$$\nabla^2 \vec{N} + k^2 \vec{N} = 0 \quad \text{y} \quad \nabla \times \vec{N} = k \vec{M}.$$

El problema para calcular los campos electromagnéticos tanto dentro como fuera de la partícula, se reduce a calcular las soluciones a la ecuación de onda escalar para las funciones escalares ψ , que son funciones generadoras de los armónicos vectoriales \vec{M} y \vec{N} ; el vector \vec{c} se conoce como vector guía. Se propone que el campo vectorial \vec{M} cumpla que

$$\vec{M} = \nabla \times (\vec{r}\psi), \quad (1.202)$$

donde \vec{M} es siempre perpendicular al vector posición \vec{r} y satisface la Ec. (1.198). Para calcular los campos electromagnéticos dentro y fuera de la partícula, se considera el caso en que una onda plana monocromática se propaga a lo largo del eje \hat{z} , ver Fig. 1.11, e ilumina una partícula esférica de radio a e índice de refracción N_1 , embebida en un medio con índice de refracción N . La ecuación de Helmholtz en coordenadas esféricas se escribe como

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + k^2 \psi = 0. \quad (1.203)$$

Para resolver la Ec. (1.203) se utiliza el método de separación de variables

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi). \quad (1.204)$$

Sustituyendo la Ec. (1.204) en la Ec. (1.203), se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales para cada una de las coordenadas:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m^2 \Phi = 0, \quad (1.205)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0, \quad (1.206)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[k^2 r^2 - n(n+1) \right] R = 0. \quad (1.207)$$

Las funciones generadoras impares ψ_{imn} y pares ψ_{pmn} definidas como

$$\psi_{imn} = \cos m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(kr), \quad (1.208)$$

$$\psi_{pmn} = \sin m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(kr), \quad (1.209)$$

son solución a las Ecs. (1.205) - (1.207), y por lo tanto son solución a la Ec. (1.203) [22]. En las Ecs. (1.208) y (1.209), m es el orden y n el grado de las funciones asociadas de Legendre de primer tipo y $z_n(kr)$ son las funciones esféricas de Bessel [23]. Los armónicos esféricos vectoriales

generados por ψ_{imn} y ψ_{pmn} son

$$\begin{aligned}\vec{M}_{pmn} &= \nabla \times (\vec{r}\psi_{pmn}), & \vec{M}_{imn} &= \nabla \times (\vec{r}\psi_{imn}), \\ \vec{N}_{pmn} &= \nabla \times \vec{M}_{pmn}, & \vec{N}_{imn} &= \nabla \times \vec{M}_{imn}.\end{aligned}\quad (1.210)$$

De forma explícita, al desarrollar los términos de la Ec. (1.210), se obtienen expresiones para las funciones armónicas vectoriales:

$$\vec{M}_{pmn} = \frac{-m}{\sin \theta} \sin m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(\rho) \hat{\theta} - \cos m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{\phi}, \quad (1.211a)$$

$$\vec{M}_{imn} = \frac{m}{\sin \theta} \cos m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(\rho) \hat{\theta} - \sin m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{\phi}, \quad (1.211b)$$

$$\begin{aligned}\vec{N}_{pmn} &= \cos m\phi \frac{z_n(\rho)}{\rho} n(n+1) P_n^m(\cos \theta) \hat{r} \\ &+ \cos m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\theta} \\ &- m \sin m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\phi},\end{aligned}\quad (1.211c)$$

$$\begin{aligned}\vec{N}_{imn} &= \sin m\phi \frac{z_n(\rho)}{\rho} n(n+1) P_n^m(\cos \theta) \hat{r} \\ &+ \sin m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\theta} \\ &- m \cos m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\phi}.\end{aligned}\quad (1.211d)$$

Cualquier solución a las Ecs. (1.198) puede ser expresada como una serie de funciones armónicas vectoriales \vec{M}_{pmn} , \vec{M}_{imn} , \vec{N}_{pmn} y \vec{N}_{imn} .

Expansión de una onda plana en armónicos esféricos vectoriales

Una onda armónica plana polarizada en la dirección \hat{x} con longitud de onda λ , que incide sobre una partícula esférica de radio a , ver Fig. 1.11, se expresa en coordenadas esféricas como

$$\vec{E}_i = E_0 e^{ikr \cos \theta} e^{-i\omega t} \hat{x}, \quad (1.212)$$

donde $k = 2\pi N/\lambda$, es el número de onda asociado al medio que rodea la partícula, N es el índice de refracción correspondiente a este medio (la matriz), λ es la longitud de onda de la onda electromagnética incidente en el vacío, ω su frecuencia angular y E_0 es la amplitud del campo eléctrico incidente. Al expandir la Ec. (1.212) en términos de los armónicos esféricos vectoriales se tiene que

$$\vec{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \left(B_{pmn} \vec{M}_{pmn} + B_{imn} \vec{M}_{imn} + A_{pmn} \vec{N}_{pmn} + A_{imn} \vec{N}_{imn} \right) e^{-i\omega t}, \quad (1.213)$$

donde A_{imn} , A_{pmn} , B_{imn} y B_{pmn} son los coeficientes complejos de la expansión, y debido a la

ortogonalidad de los armónicos esféricos vectoriales, están dados por

$$B_{pmn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{E}_i \cdot \vec{M}_{pmn} \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\vec{M}_{pmn}|^2 \sin \theta d\theta d\phi}, \quad B_{imn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{E}_i \cdot \vec{M}_{imn} \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\vec{M}_{imn}|^2 \sin \theta d\theta d\phi}, \quad (1.214)$$

$$A_{pmn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{E}_i \cdot \vec{N}_{pmn} \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\vec{N}_{pmn}|^2 \sin \theta d\theta d\phi}, \quad A_{imn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{E}_i \cdot \vec{N}_{imn} \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\vec{N}_{imn}|^2 \sin \theta d\theta d\phi}. \quad (1.215)$$

En el caso cuando $m = 0$ las funciones vectoriales \vec{N}_{imn} y \vec{M}_{imn} son cero. Por otra parte, la ortogonalidad de \vec{M}_{pmn} y \vec{N}_{pmn} , cuando $m = 0$, se debe a la ortogonalidad de las funciones asociadas de Legendre en el intervalo de 0 a 2π

$$\int_0^\pi \left(\frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + m^2 \frac{P_n^m P_{n'}^m}{\sin^2 \theta} \right) \sin \theta d\theta = 0. \quad (1.216)$$

A partir de las funciones vectoriales \vec{M}_{pmn} y \vec{N}_{imn} , Ecs. (1.211a) y (1.211d), y de la ortogonalidad de las funciones seno y coseno, se cumple que los coeficientes A_{pmn} y B_{imn} son cero para todo m y n . Los coeficientes restantes de la suma en la Ec. (1.213) son cero a menos que $m = 1$. En las Ecs. (1.208) y (1.209), la función $z_n = j_n(kr)$, ya que las funciones $j_n(kr)$ no divergen en el origen, condición que debe satisfacerse para el campo electromagnético incidente. Por lo tanto, la expansión en serie para el campo electromagnético incidente se escribe como

$$\vec{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(\vec{M}_{o1n}^1 - i\vec{N}_{e1n}^1 \right), \quad (1.217)$$

$$\vec{H}_i = \frac{-k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(\vec{M}_{e1n}^1 + i\vec{N}_{o1n}^1 \right), \quad (1.218)$$

donde $E_n = i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)}$ y el superíndice 1 en la expresión de los esféricos armónicos vectoriales indica que el comportamiento radial de las funciones generadoras, Ecs. (1.208) y (1.209), está dado por las funciones de Bessel tipo 1: $j_n(kr)$. El campo \vec{H}_i se obtiene a partir de la ley de Faraday, Ec. (1.199c).

Las expresiones para los campos electromagnéticos esparcidos fuera de la esfera (\vec{E}_s, \vec{H}_s) e internos, dentro de la esfera (\vec{E}_I, \vec{H}_I), también pueden expresarse como la suma de funciones armónicas esféricas vectoriales. En la interfaz de la partícula esférica, las condiciones impuestas por la Ec. (1.27) son

$$(\vec{E}_i + \vec{E}_s - \vec{E}_I) \times \hat{r} = (\vec{H}_i + \vec{H}_s - \vec{H}_I) \times \hat{r} = 0. \quad (1.219)$$

Los campos esparcidos fuera de la esfera y los campos internos dentro de la esfera están relacionados con el campo electromagnético incidente, Ecs. (1.217) y (1.218), por la Ec. (1.219). En consecuencia todos los coeficientes de las expansiones para los campos esparcidos e internos son cero cuando $m \neq 1$. De nueva cuenta, el campo electromagnético interno debe ser finito en el origen, por lo que la función esférica de Bessel apropiada es $j_n(k_1 r)$, donde $k_1 = 2\pi N_1/\lambda$ es el número de onda asociado al medio dentro de la partícula y N_1 el índice de refracción correspondiente a la

partícula esférica. La expansión en armónicos esféricos vectoriales para el campo interno es

$$\vec{E}_I = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(c_n \vec{M}_{o1n}^1 - id_n \vec{N}_{e1n}^1 \right), \quad (1.220)$$

$$\vec{H}_I = \frac{-k_1}{\omega \mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(d_n \vec{M}_{e1n}^1 + ic_n \vec{N}_{o1n}^1 \right), \quad (1.221)$$

donde μ_1 es la permeabilidad magnética de la partícula esférica. En la región fuera de la esfera, la función esférica de Bessel apropiada es $h_n(kr)$, la cual se conoce como función esférica de Hankel de tipo 1 [23]. La expansión en armónicos esféricos vectoriales para el campo esparcido es

$$\vec{E}_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(ia_n \vec{N}_{e1n}^3 - b_n \vec{M}_{o1n}^3 \right), \quad (1.222)$$

$$\vec{H}_s = \frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(ib_n \vec{N}_{o1n}^3 + a_n \vec{M}_{e1n}^3 \right). \quad (1.223)$$

Los índices en las funciones \vec{M}^i y \vec{N}^i denotan la clase de función esférica de Bessel adecuada, z_n : ($i=1$) $j_n(kr)$; ($i=3$) $h_n^1(kr)$. A partir de las Ecs. (1.211), las expresiones para los armónicos esféricos vectoriales son

$$\vec{M}_{i1n} = \cos \phi \pi_n z_n(\rho) \hat{\theta} - \sin \phi \tau_n z_n(\rho) \hat{\phi}, \quad (1.224a)$$

$$\vec{M}_{p1n} = -\sin \phi \pi_n z_n(\rho) \hat{\theta} - \cos \phi \tau_n z_n(\rho) \hat{\phi}, \quad (1.224b)$$

$$\vec{N}_{i1n} = \sin \phi n(n+1) \sin \theta \pi_n \frac{z_n}{\rho} \hat{r} + \sin \phi \tau_n \frac{[\rho z_n(\rho)]'}{\rho} \hat{\theta} + \cos \phi \pi_n \frac{[\rho z_n(\rho)]'}{\rho} \hat{\phi}, \quad (1.224c)$$

$$\vec{N}_{p1n} = \cos \phi n(n+1) \sin \theta \pi_n \frac{z_n}{\rho} \hat{r} + \cos \phi \tau_n \frac{[\rho z_n(\rho)]'}{\rho} \hat{\theta} - \sin \phi \pi_n \frac{[\rho z_n(\rho)]'}{\rho} \hat{\phi}, \quad (1.224d)$$

donde las comillas denotan la derivada con respecto al argumento. En el conjunto de Ecs. (1.224a) - (1.224d), la dependencia angular polar en los armónicos esféricos vectoriales está dada por las funciones

$$\pi_n = P_n(\cos \theta) / \sin \theta \quad \text{y} \quad \tau_n = dP_n(\cos \theta) / d\theta, \quad (1.225)$$

donde P_n son los polinomios de Legendre [23].

Coefficientes de esparcimiento

Para calcular los coeficientes de los campos interno y esparcido, dados por las Ecs. (1.220) - (1.223), es necesario evaluar los campos en la frontera de la partícula esférica, ver Ec. (1.219). En términos de las componentes transversales a la dirección \hat{r} , la Ec. (1.219) se reescribe como

$$E_{i\theta} + E_{s\theta} = E_{I\theta}, \quad (1.226)$$

$$H_{i\theta} + H_{s\theta} = H_{I\theta}, \quad (1.227)$$

$$E_{i\phi} + E_{s\phi} = E_{I\phi}, \quad (1.228)$$

$$H_{i\phi} + H_{s\phi} = H_{I\phi}. \quad (1.229)$$

Al sustituir las expresiones en serie de los campos electromagnéticos incidente, interno y esparcido dados por las Ecs. (1.217), (1.218), (1.220) - (1.223), en términos de los armónicos esféricos vectoriales, Ecs. (1.224a) - (1.224d), en el conjunto de ecuaciones Ecs. (1.226) - (1.229), se obtienen relaciones para los coeficientes a_n , b_n , c_n y d_n . Considerando $x = ka = 2\pi Na/\lambda$ y $m = k_1/k = N_1/N$, y a partir de las Ecs. (1.226) - (1.229), se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones lineales (ver Sec. 3.4), que relacionan a los coeficientes a_n , b_n , c_n y d_n :

$$j_n(mx)c_n + h_n^1(x)b_n = j_n(x), \quad (1.230a)$$

$$\mu[mxj_n(mx)]'c_n + \mu_1[xh_n^1(x)]'b_n = \mu_1[xj_n(x)]', \quad (1.230b)$$

$$\mu mj_n(mx)d_n + \mu_1 h_n^1(x)a_n = \mu_1 j_n(x), \quad (1.230c)$$

$$[mxj_n(mx)]'d_n + m[xh_n^1(x)]'a_n = m[xj_n(x)]'. \quad (1.230d)$$

Las cuatro ecuaciones lineales de la Ec. (1.230) se resuelven para los coeficientes, tanto de los campos electromagnéticos dentro de la partícula

$$c_n = \frac{\mu_1 j_n(x)[xh_n^1(x)]' - \mu_1 h_n^1(x)[xj_n(x)]'}{\mu_1 j_n(mx)[xh_n^1(x)]' - \mu h_n^1(x)[mxj_n(mx)]'}, \quad (1.231)$$

$$d_n = \frac{\mu_1 m j_n(x)[xh_n^1(x)]' - \mu_1 m h_n^1(x)[xj_n(x)]'}{\mu m^2 j_n(mx)[xh_n^1(x)]' - \mu_1 h_n^1(x)[mxj_n(mx)]'}, \quad (1.232)$$

como para los campos electromagnéticos esparcidos por la partícula esférica

$$a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx)[xj_n(x)]' - \mu_1 j_n(x)[mxj_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx)[xh_n^1(x)]' - \mu_1 h_n^1(x)[mxj_n(mx)]'}, \quad (1.233)$$

$$b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx)[xj_n(x)]' - \mu j_n(x)[mxj_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx)[xh_n^1(x)]' - \mu h_n^1(x)[mxj_n(mx)]'}, \quad (1.234)$$

las comillas denotan la derivada con respecto a la variable r . La expansión en serie del campo electromagnético esparcido tiene modos dominantes asociados a las propiedades ópticas y geométricas del material. Dado n , las condiciones para que a_n y b_n sean modos dominantes, están dadas, respectivamente, por

$$\frac{[xh_n^1(x)]'}{h_n^1(x)} \simeq \frac{\mu_1[mxj_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx)}, \quad (1.235)$$

$$\frac{[xh_n^1(x)]'}{h_n^1(x)} \simeq \frac{\mu[mxj_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx)}. \quad (1.236)$$

Las frecuencias que satisfacen las Ecs. (1.235) y (1.236), corresponden a las frecuencias de los modos plasmónicos de la partícula. Computacionalmente, se tiene mayor estabilidad numérica al calcular los coeficientes de esparcimiento, Ecs. (1.233) y (1.234), utilizando las funciones de

Riccati-Bessel [23]

$$\begin{aligned}\Psi_n(\rho) &= \rho j_n(\rho), & \xi(\rho) &= \rho h_n^1(\rho), \\ \Psi_n(mx) &= mx j_n(mx), & \xi(mx) &= mx h_n^1(mx), \\ \Psi_n(x) &= x j_n(x), & \xi(x) &= x h_n^1(x).\end{aligned}$$

Considerando que tanto el medio que rodea a la partícula esférica como la partícula son medios no magnéticos, es decir, $\mu = \mu_1 = 1$, los coeficiente a_n y b_n se reescriben, respectivamente, como

$$a_n = \frac{m\Psi_n(mx)\Psi'_n(x) - \Psi_n(x)\Psi'_n(mx)}{m\Psi_n(mx)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\Psi'_n(mx)}, \quad (1.237)$$

$$b_n = \frac{\Psi_n(mx)\Psi'_n(x) - m\Psi_n(x)\Psi'_n(mx)}{\Psi_n(mx)\xi'_n(x) - m\xi_n(x)\Psi'_n(mx)}. \quad (1.238)$$

El caso particular cuando $m \sim 1$, los coeficientes de esparcimiento, Ecs. (1.237) y (1.238), son aproximadamente cero, es decir, no hay partícula y por lo tanto tampoco hay campo esparcido. Lo mismo sucede para los coeficientes c_n y d_n , que relacionan el campo electromagnético dentro de la partícula.

Secciones transversales de absorción y esparcimiento

A partir de las expresiones para los campos electromagnéticos dados por las Ecs. (1.217), (1.218), (1.220) - (1.223), es posible calcular el vector de Poynting en todo punto del espacio. El vector de Poynting está definido como

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}^*,$$

donde \vec{H}^* denota el complejo conjugado del campo H, y S representa la energía por unidad de tiempo y área transportados por los campos electromagnéticos. El vector de Poynting es una función que varía en el tiempo, por lo que los instrumentos de medición detectan promedios temporales del vector de Poynting⁹. Denotando con el subíndice 2 a los campos fuera de la partícula, el vector de Poynting en cualquier punto fuera de la partícula se escribe como la suma de tres términos, de tal forma que

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}(\vec{E}_2 \times \vec{H}_2^*) = \langle \vec{S}_i \rangle + \langle \vec{S}_s \rangle + \langle \vec{S}_{ext} \rangle,$$

con

$$\langle \vec{S}_i \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}(\vec{E}_i \times \vec{H}_i^*), \quad (1.239)$$

$$\langle \vec{S}_s \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}(\vec{E}_s \times \vec{H}_s^*), \quad (1.240)$$

$$\langle \vec{S}_{ext} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}(\vec{E}_i \times \vec{H}_s^* + \vec{E}_s \times \vec{H}_i^*), \quad (1.241)$$

donde $\langle \vec{S}_i \rangle$ es el promedio temporal del vector de Poynting asociado al campo electromagnético

⁹ $\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \vec{S}(t') dt'$, donde $\tau > 1/\omega$ [24].

incidente, $\langle \vec{S}_s \rangle$ y $\langle \vec{S}_{ext} \rangle$ corresponden a los promedios temporales del vector de Poynting asociados a los campos electromagnéticos esparcido y extinguido, respectivamente.

Considerando una superficie cerrada A que encierra a la partícula esférica, sobre la cual incide una onda electromagnética, y considerando que la partícula se encuentra embebida en un medio no absorbente, la energía que atraviesa la superficie A y que contiene a la partícula está dada por la expresión

$$W_{abs} = - \int_A \langle \vec{S} \rangle \cdot \hat{r} dA, \quad (1.242)$$

donde \hat{r} es el vector normal a la superficie de la partícula esférica y $\langle \vec{S} \rangle \cdot \hat{r} dA$ es la energía por unidad de tiempo que cruza el diferencial de área $\hat{r} dA$, también conocida como irradiancia. Si $\langle \vec{S} \rangle$ es negativo entonces W_{abs} es positivo dentro del volumen delimitado por la superficie A y entonces la energía es absorbida. Sustituyendo las Ecs. (1.239) - (1.241), en la Ec. (1.242), se tiene que

$$W_{abs} = - \int_A \langle \vec{S} \rangle \cdot \hat{r} dA = - \int_A \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \hat{r} dA + \int_A \langle \vec{S}_s \rangle \cdot \hat{r} dA - \int_A \langle \vec{S}_{ext} \rangle \cdot \hat{r} dA = W_i - W_s + W_{ext}.$$

Debido a que el medio que rodea a la partícula es no absorbente entonces $W_i = 0$. W_s es la razón con la cual la energía es esparcida por la partícula y atraviesa la superficie A . La extinción es, entonces es la suma de la razón de energía absorbida y la esparcida:

$$W_{ext} = W_{abs} + W_s. \quad (1.243)$$

Al considerar una onda electromagnética que incide polarizada linealmente en el eje x , $\vec{E}_i = E_i \hat{e}_x$, entonces las expresiones para el campo eléctrico y el campo H esparcidos, en la región de campo lejano, se escriben como [22]

$$\vec{E}_s \sim \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \vec{X} E_i \quad \text{y} \quad \vec{H}_s \sim \frac{k}{\omega\mu} \hat{e}_r \times \vec{E}_s, \quad (1.244)$$

donde \vec{X} es el vector de amplitud de esparcimiento, que cumple $\hat{r} \cdot \vec{X} = 0$, y está relacionado con los coeficientes de la matriz de amplitud de esparcimiento de la siguiente forma

$$\vec{X} = (S_2 \cos \phi + S_3 \sen \phi) \hat{e}_{\parallel s} + (S_4 \cos \phi + S_1 \sen \phi) \hat{e}_{\perp s}. \quad (1.245)$$

El cociente de las expresiones W_{ext} , W_s y la irradiancia incidente I_i son cantidades con dimensiones de área, dadas por

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_i} = \frac{4\pi}{k^2} \text{Re}(\vec{X} \cdot \hat{e}_x)_{\theta=0} \quad (1.246)$$

y

$$C_s = \frac{W_s}{I_i} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{|\vec{X}|^2}{k^2} \sen \theta d\theta d\phi = \int_{4\pi} \frac{|\vec{X}|^2}{k^2} d\Omega. \quad (1.247)$$

De la Ec. (1.243), la sección transversal de extinción C_{ext} corresponde a la suma de las contribuciones de la sección transversal de absorción C_{abs} y la sección transversal de esparcimiento C_s :

$$C_{ext} = C_s + C_{abs}. \quad (1.248)$$

El término $|\vec{X}|^2/k^2$ en la Ec. (1.247) contiene información sobre la distribución angular de la onda esparcida: la cantidad de luz (por unidad de irradiancia incidente) esparcida en un ángulo sólido en una dirección dada. Los factores de eficiencia, cantidades adimensionales para una partícula aislada, se definen de la siguiente forma

$$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{G}, \quad Q_{sca} = \frac{C_{sca}}{G}, \quad Q_{abs} = \frac{C_{abs}}{G},$$

donde G es el área transversal de la esfera proyectada en un plano perpendicular al plano de incidencia, para una esfera de radio a se tiene que $G = \pi a^2$. A partir de la Ec. (1.241), se tiene que

$$W_{ext} = \int_A \vec{S}_{ext} \cdot \hat{e}_r dA = \frac{1}{2} \text{Re} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{i\phi} H_{s\theta}^* - E_{i\theta} H_{s\phi}^* - E_{s\theta} H_{i\phi}^* + E_{s\phi} H_{i\theta}^*) r^2 \sin \theta d\theta d\phi, \quad (1.249)$$

mientras que la potencia esparcida está dada por

$$W_s = \int_A \vec{S}_s \cdot \hat{e}_r dA = \frac{1}{2} \text{Re} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{s\theta} H_{s\phi}^* - E_{s\phi} H_{s\theta}^*) r^2 \sin \theta d\theta d\phi. \quad (1.250)$$

Para evaluar las integrales de las Ecs. (1.249) y (1.250), se considera una onda electromagnética polarizada linealmente en la dirección \hat{e}_x , y se utilizan las expresiones de la Ecs. (1.217) y (1.218), para el campo incidente, así como las expresiones de los armónicos vectoriales de la Ecs. (1.211), dando como resultado que las componentes del campo eléctrico y el campo H son

$$\begin{aligned} E_{i\theta} &= \frac{\cos \theta}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (\psi_n \pi_n - i \psi'_n \tau_n), & H_{i\theta} &= \frac{k}{\omega \mu} \tan \phi E_{i\theta}, \\ E_{i\phi} &= \frac{\sin \phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i \psi'_n \pi_n - \psi_n \tau_n), & H_{i\phi} &= \frac{-k}{\omega \mu} \cot \phi E_{i\phi}, \end{aligned} \quad (1.251)$$

donde $\rho = kr$, $k = 2\pi N_1/\lambda$, con N_1 el índice de refracción del medio en que está embebida la partícula esférica y λ la longitud de onda incidente, r es el radio de la superficie cerrada de área A . De las Ecs. (1.222) y (1.223), el campo esparcido correspondiente a una onda electromagnética polarizada linealmente en la dirección \hat{x} es

$$\begin{aligned} E_{s\theta} &= \frac{\cos \theta}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i a_n \xi'_n \tau_n - b_n \xi_n \pi_n), & H_{s\theta} &= \frac{k}{\omega \mu} \frac{\sin \theta}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i b_n \xi'_n \tau_n - a_n \xi_n \pi_n), \\ E_{s\phi} &= \frac{\sin \phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (b_n \xi_n \tau_n - i a_n \xi'_n \pi_n), & H_{s\phi} &= \frac{k}{\omega \mu} \frac{\cos \theta}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i b_n \xi'_n \pi_n - a_n \xi_n \tau_n). \end{aligned} \quad (1.252)$$

Sustituyendo las Ecs. (1.251) y (1.252) en las Ecs. (1.249) y (1.250), y haciendo uso de la propiedad del Wronskiano¹⁰, se tiene que las secciones de extinción y esparcimiento se reescriben como

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n), \quad (1.253)$$

¹⁰Las funciones ψ_n y ξ_n son reales para argumentos reales, por lo tanto $\xi_n \psi'_n - \psi_n \xi'_n = 1$.

y

$$C_s = \frac{W_s}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2), \quad (1.254)$$

con los coeficientes a_n y b_n definidos por las Ecs. (1.237) y (1.238), respectivamente.

1.7. Métodos numéricos para resolver las ecuaciones de Maxwell

En esta sección se derivan soluciones numéricas a las ecuaciones de Maxwell en presencia de materiales con forma arbitraria, en términos de ecuaciones integro-diferenciales de superficie evaluadas en la frontera del material. El campo electromagnético inducido por una onda electromagnética incidente se calcula de forma auto consistente a partir de las cargas y corrientes calculadas en la frontera del material. A este método se le conoce como *método de elemento en la frontera* (BEM), desarrollado por García de Abajo y Howie [25].

1.7.1. Elementos básicos de la teoría BEM

Las ecuaciones de Maxwell, en el espacio de frecuencias ω ¹¹, son

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext}, \quad (1.255a)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.255b)$$

$$\nabla \times \vec{E} - i\omega\vec{B} = 0, \quad (1.255c)$$

$$\nabla \times \vec{H} + i\omega\vec{D} = \vec{J}_{ext}, \quad (1.255d)$$

donde $\omega = kc$, en medios lineales $\vec{D} = \epsilon\vec{E}$ es el vector de desplazamiento eléctrico, el campo \vec{H} está definido como $\vec{H} = \vec{B}/\mu_0 - \vec{M}$ ¹² y su relación con el campo magnético \vec{B} es $\vec{B} = \mu\vec{H}$ ¹³. Tanto la función dieléctrica $\epsilon(\vec{r}, \omega)$ como la permeabilidad magnética $\mu(\vec{r}, \omega)$ son funciones que dependen del espacio \vec{r} y de la frecuencia ω . Las Ecs. (1.255c) y (1.255d) permiten expresar al campo eléctrico \vec{E} y el campo \vec{H} en función del potencial escalar ϕ y el potencial vectorial \vec{A} de la siguiente forma

$$\vec{E} = i\omega\vec{A} - \nabla\phi \quad (1.256)$$

¹¹Para obtener la representación en el espacio de frecuencias se utiliza la siguiente convención para la transformada de Fourier:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{-i\omega t} d\omega.$$

¹² \vec{M} es el vector de magnetización, definido como $\vec{M} = \chi_m\vec{H}$, χ_m es la susceptibilidad magnética.

¹³Para medios no lineales, tanto la función dieléctrica ϵ como la permeabilidad magnética μ son tensores de rango dos [26].

y

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{A}, \quad (1.257)$$

donde $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$. Tanto el vector de desplazamiento \vec{D} como el vector \vec{H} dependen del espacio \vec{r} y de la frecuencia ω . Partiendo de la Ec. (1.255a), se tiene

$$\nabla \cdot \vec{D} = \nabla \cdot (\epsilon \vec{E}) = \rho_{ext}. \quad (1.258)$$

Al desarrollar la divergencia de un producto de funciones se obtiene

$$\epsilon \nabla \cdot \vec{E} + \vec{E} \cdot \nabla \epsilon = \rho_{ext}, \quad (1.259)$$

y sustituyendo la Ec. (1.256) en la Ec. (1.259), se tiene que

$$\nabla^2 \phi - i\omega \nabla \cdot \vec{A} = \frac{1}{\epsilon} \left[-\rho_{ext} + \vec{E} \cdot \nabla \epsilon \right], \quad (1.260)$$

debido a que¹⁴

$$\nabla \epsilon = -\epsilon^2 \nabla \left(\frac{1}{\epsilon} \right),$$

entonces

$$\nabla^2 \phi - i\omega \nabla \cdot \vec{A} = - \left[\frac{\rho_{ext}}{\epsilon} + \sigma_s \right], \quad (1.261)$$

donde

$$\sigma_s = \vec{D} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\epsilon} \right).$$

De igual forma, si se sustituyen los campos \vec{E} y \vec{H} en términos de los potenciales escalar y vectorial en la Ec. (1.255d), se obtiene

$$\frac{1}{\mu} \left[\nabla^2 \vec{A} - \nabla(\nabla \cdot \vec{A}) \right] + \mu \vec{H} \times \nabla \left(\frac{1}{\mu} \right) = \vec{J}_{ext} - i\omega \left[\epsilon(\nabla \phi - i\omega \vec{A}) \right],$$

como¹⁵

$$\mu \nabla \left(\frac{1}{\mu} \right) = -\frac{1}{\mu} \nabla \mu,$$

entonces

$$\left[\nabla^2 \vec{A} - \nabla(\nabla \cdot \vec{A}) \right] = -\mu \vec{J}_{ext} - i\omega \epsilon \mu \nabla \phi - \epsilon \mu \omega^2 \vec{A} + \vec{H} \times \nabla \mu. \quad (1.262)$$

La propiedad del operador gradiente sobre funciones escalares cumple que

$$\nabla [\phi(\epsilon\mu)] = \epsilon\mu \nabla \phi + \phi \nabla \epsilon\mu,$$

entonces la Ec. (1.262) se reescribe como

$$\left[\nabla^2 \vec{A} + \epsilon \mu \omega^2 \vec{A} - \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} - i\omega \epsilon \mu \phi \right) \right] = - \left[\mu \vec{J}_{ext} - \vec{H} \times \nabla \mu - i\omega \phi \nabla \epsilon \mu \right],$$

¹⁴ $\nabla \left(\frac{1}{\epsilon} \right) = \frac{\partial(1/\epsilon)}{\partial n} = \frac{-1}{\epsilon^2} \frac{\partial \epsilon}{\partial n} = \frac{-1}{\epsilon^2} \nabla \epsilon.$

¹⁵ $\mu \nabla \left(\frac{1}{\mu} \right) = \mu \frac{\partial(1/\mu)}{\partial n} = \frac{-1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial n} = \frac{-1}{\mu} \nabla \mu.$

y finalmente

$$\left[\nabla^2 \vec{A} + \omega^2 \epsilon \mu \vec{A} - \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} - i\omega \epsilon \mu \phi \right) \right] = - \left[\mu \vec{J}_{ext} + \vec{m} \right], \quad (1.263)$$

donde

$$\vec{m} = - \left[\vec{H} \times \nabla \mu + i\omega \phi \nabla \epsilon \mu \right].$$

Al resolver el sistema de ecuaciones acopladas dado por las Ecs. (1.261) y (1.263), se obtienen soluciones para los potenciales ϕ y \vec{A} , y a su vez la solución para los campos \vec{E} y \vec{H} , que satisfacen las ecuaciones de Maxwell. Para resolver el sistema de ecuaciones acoplado se utiliza la norma de Lorentz:

$$\nabla \cdot \vec{A} = i\omega \epsilon \mu \phi. \quad (1.264)$$

Sustituyendo la Ec. (1.264) en las Ecs. (1.261) y (1.263) se obtienen expresiones para ϕ y \vec{A} , dadas por

$$(\nabla^2 + \omega^2 \epsilon \mu) \phi = - \left(\frac{\rho_{ext}}{\epsilon} + \sigma_s \right), \quad (1.265)$$

y

$$(\nabla^2 + \omega^2 \epsilon \mu) \vec{A} = - \left(\mu \vec{J}_{ext} + \vec{m} \right). \quad (1.266)$$

Cabe resaltar que las Ecs. (1.265) y (1.266) son válidas para cualquier función dieléctrica $\epsilon(\vec{r}, \omega)$ y permeabilidad magnética $\mu(\vec{r}, \omega)$.

El problema de interés considera una interfaz abrupta que separa el medio 1 del medio 2, ver Fig. 1.12.

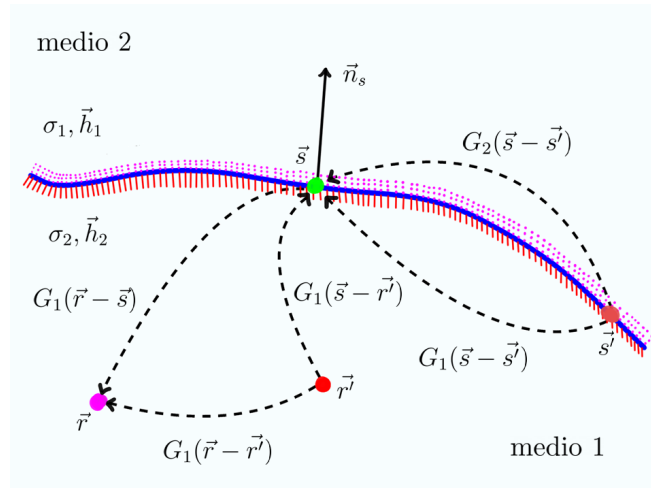


Fig. 1.12: Representación esquemática de los elementos involucrados en la solución a las ecuaciones de Maxwell, en presencia de interfaces arbitrarias con el método de elemento en la frontera BEM. La interfaz separa el medio 1 del medio 2. La normal de la interfaz \vec{n}_s en un punto \vec{s} arbitrario en la interfaz se elige para dirigirse hacia el medio 2.

Los medios están caracterizados por las funciones (ϵ_1, μ_1) para el medio 1 y (ϵ_2, μ_2) para el medio 2. Para una interfaz abrupta, se tiene [25]

$$\sigma_s = (1/\epsilon_2 - 1/\epsilon_1)\vec{n}_s\vec{D}\delta_s \quad \text{y} \quad \vec{m} = \left[i\omega(\epsilon_1\mu_1 - \epsilon_2\mu_2)\phi\vec{n}_s + (\mu_1 - \mu_2)\vec{H} \times \vec{n}_s \right] \delta_s, \quad (1.267)$$

donde δ_s es una función delta de superficie. En las Ecs. (1.265) y (1.266), las cantidades σ_s y \vec{m} tienen valores distintos de cero sólo en la interfaz. De la Ec. (1.267) se observa que en materiales no magnéticos, el vector \vec{m} no es paralelo a la interfaz, sino que es normal a la misma por lo que \vec{m} no representa una corriente física. Por otra parte, σ representa cargas adicionales en la frontera originadas por la discontinuidad de las funciones ϵ y μ [26]. El método de elemento en la frontera (BEM) no utiliza las cargas y corrientes (σ, \vec{m}) , si no que introduce cargas y corrientes apropiadas sujetas a las condiciones de frontera apropiadas de los campos electromagnéticos en la interfaz entre el medio 1 y el medio 2 [26]. Las soluciones a las Ecs. (1.265) y (1.266) que satisfacen ser cero en infinito, son

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_j(\omega)} \int d\vec{r}' G_j(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho_{ext}(\vec{r}') + \int_{S_j} d\vec{s} G_j(|\vec{r} - \vec{s}|) \sigma_j(\vec{s}), \quad (1.268)$$

$$\vec{A}(\vec{r}) = \mu_j \int d\vec{r}' G_j(|\vec{r} - \vec{r}'|) \vec{J}_{ext}(\vec{r}') + \int_{S_j} d\vec{s} G_j(|\vec{r} - \vec{s}|) \vec{h}_j(\vec{s}), \quad (1.269)$$

donde \vec{r} está dentro de cada medio y S_j denota la frontera del medio $j = 1, 2$, y

$$G_j(r) = \frac{e^{ik_j r}}{r}, \quad (1.270)$$

es la función de Green solución a la ecuación de onda con una carga puntual como fuente

$$[\nabla^2 + k_j^2] G_j(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (1.271)$$

donde el subíndice j hace referencia al medio y $k_j = k\sqrt{\epsilon_j\mu_j}$. Las cantidades σ_j y \vec{h}_j no representan cargas y corrientes físicas en la interfaz [27]. Por construcción, las Ecs. (1.268) y (1.269) satisfacen las Ecs. (1.265) y (1.266). Los primeros términos de las Ecs. (1.268) y (1.269) cumplen con ser solución en todo punto de los medios homogéneos, excepto en la interfaz entre éstos, donde $\sigma_s \neq 0$ y $\vec{m} \neq \vec{0}$. Los segundos términos de las Ecs. (1.268) y (1.269) incluyen los efectos producidos por σ_s y \vec{m} , y de forma parcial compensan el hecho de que la función de Green es discontinua en la interfaz [26]. Las Ecs. (1.268) y (1.269) serán solución a las Ecs. (1.265) y (1.266), si es posible escoger la densidad de carga superficial σ_j y la corriente \vec{m} de tal forma que se cumplan las condiciones de frontera impuestas por las ecuaciones de Maxwell. La continuidad de la componente tangencial del campo eléctrico \vec{E} y la componente normal del campo \vec{H} resultan en la continuidad de los potenciales ϕ y \vec{A} . Esto es, en la interfaz entre los dos medios homogéneos (ver Fig. 1.12) se tiene que

$$\phi_2 - \phi_1 = 0, \quad (1.272)$$

$$\hat{n}_s \times (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) = \vec{0}, \quad (1.273)$$

$$\hat{n}_s \cdot (\epsilon_2 \vec{E}_2 - \epsilon_1 \vec{E}_1) = \sigma_{ext}, \quad (1.274)$$

$$\hat{n}_s \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) = \vec{K}_{ext}, \quad (1.275)$$

donde σ_{ext} y \vec{K}_{ext} son las cargas y corrientes externas superficiales, el vector \vec{n}_s está definido en dirección hacia el medio 2, ver Fig. 1.12. Sustituyendo las Ecs. (1.268) y (1.269) en las Ecs. (1.272) y (1.273), se obtiene¹⁶

$$\phi_2^{ext} - \phi_1^{ext} = G_1\sigma_1 - G_2\sigma_2 \quad (1.276)$$

y

$$\vec{A}_2^{ext} - \vec{A}_1^{ext} = G_1\vec{h}_1 - G_2\vec{h}_2, \quad (1.277)$$

donde $\phi_j^{ext}(\vec{s})$ y $\vec{A}_j^{ext}(\vec{s})$ corresponden a

$$\phi_j^{ext}(\vec{s}) = \mu_j(\omega) \int d\vec{r}' G_j(|\vec{s} - \vec{r}'|) \rho_{ext}(\vec{r}') \quad (1.278)$$

y

$$\vec{A}_j^{ext}(\vec{s}) = \frac{1}{\epsilon_j(\omega)} \int d\vec{r}' G_j(|\vec{s} - \vec{r}'|) \vec{J}_{ext}(\vec{r}'). \quad (1.279)$$

$\phi_j^{ext}(\vec{s})$ y $\vec{A}_j^{ext}(\vec{s})$ son las fuentes equivalentes en la frontera que escalan linealmente con la perturbación externa ($\rho_{ext}, \vec{J}_{ext}$). En la interfaz entre los medios, las fuentes equivalentes a ϕ_j^{ext} y \vec{A}_j^{ext} son los potenciales escalar y vectorial generados en la interfaz por las cargas y corrientes externas en todo el espacio homogéneo del j -ésimo medio. En el caso donde $\mu = 1$ (el medio es no magnético), la continuidad de las componentes tangenciales del campo \vec{H} y del potencial vectorial a través de la interfaz [Ecs. (1.273) y (1.275)], y de la definición del potencial vectorial, ver Ec. (1.257), se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{n}_s \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) &= \hat{n}_s \left[\nabla \times (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \right] = \nabla \left[\hat{n}_s \cdot (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \right] - (\hat{n}_s \cdot \nabla)(\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \\ &= \nabla \left[\hat{n}_s \cdot (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \right] - \hat{n}_s \left[\nabla \cdot (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \right]. \end{aligned} \quad (1.280)$$

Utilizando las Ecs. (1.264), (1.276) y (1.277) y sustituyendo en la Ec. (1.280) se obtiene [25]

$$H_1\vec{h}_1 - H_2\vec{h}_2 - i\omega\vec{n}_s(G_1\epsilon_1\mu_1\sigma_1 - G_2\epsilon_2\mu_2\sigma_2) = \vec{\alpha}, \quad (1.281)$$

donde

$$\vec{\alpha} = (\vec{n}_s \cdot \nabla_s)(\vec{A}_1^{ext} - \vec{A}_2^{ext}) + i\omega\vec{n}_s(\epsilon_1\mu_1\phi_1^{ext} - \epsilon_2\mu_2\phi_2^{ext}), \quad (1.282)$$

y \vec{H}_j es la derivada normal de la función de Green G_j que se realiza en ambos lados de la interfaz. \vec{H}_1 y \vec{H}_2 se definen como:

$$H_1(\vec{s}, \vec{s}') = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} (\vec{n}_s \cdot \nabla_s) G_1(|\vec{s} - \eta\vec{n}_s - \vec{s}'|) = (\vec{n}_s \cdot \nabla_s) G_1(|\vec{s} - \vec{s}'|) + 2\pi\delta(\vec{s} - \vec{s}'), \quad (1.283)$$

y

$$H_2(\vec{s}, \vec{s}') = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} (\vec{n}_s \cdot \nabla_s) G_2(|\vec{s} + \eta\vec{n}_s - \vec{s}'|) = (\vec{n}_s \cdot \nabla_s) G_2(|\vec{s} - \vec{s}'|) - 2\pi\delta(\vec{s} - \vec{s}'). \quad (1.284)$$

¹⁶Para simplificar la notación, se adopta la notación matricial para las coordenadas de la interfaz \vec{s} . De esta forma se pueden utilizar las coordenadas como índices de matrices y vectores. El producto de matrices y vectores como $G_j\sigma_j$ incluyen las integrales sobre la interfaz.

En las expresiones anteriores, Ecs. (1.283) y (1.284),

$$\vec{n}_s \cdot \nabla_s G_j(|\vec{s} - \vec{s}'|) = \frac{\vec{n}_s \cdot \nabla_s (\vec{s} - \vec{s}')}{|\vec{s} - \vec{s}'|^3} (ik_j |\vec{s} - \vec{s}'| - 1) e^{ik_j |\vec{s} - \vec{s}'|}.$$

En un medio infinito y homogéneo, las funciones δ en H_j , dan cuenta del campo eléctrico normal con dirección opuesta a cada lado de la interfaz. Asimismo, la continuidad de la componente normal del vector de desplazamiento eléctrico, ver Ec. (1.274), y utilizando la Ec. (1.256), se obtiene

$$D^{ext} = \vec{n}_s \cdot [\epsilon_1 (i\omega \vec{A}_1^{ext} - \nabla_s \phi_1^{ext}) - \epsilon_2 (i\omega \vec{A}_2^{ext} - \nabla_s \phi_2^{ext})], \quad (1.285)$$

y junto con las Ecs. (1.276) y (1.277), resulta en la siguiente expresión

$$H_1 \epsilon_1 \sigma_1 - H_2 \epsilon_2 \sigma_2 - i\omega \vec{n}_s (G_1 \epsilon_1 \vec{h}_1 - G_2 \epsilon_2 \vec{h}_2) = D^{ext}, \quad (1.286)$$

donde D^{ext} es la diferencia de la magnitud del vector de desplazamiento normal en la interfaz, generado por las fuentes externas en todo el espacio homogéneo del medio j -ésimo.

Las cargas y corrientes auxiliares en la interfaz σ_j y \vec{h}_j se calculan de forma auto consistente a partir de las Ecs. (1.276), (1.277), (1.281) y (1.285), de tal forma que las Ecs. (1.268) y (1.269) son soluciones a las ecuaciones de Maxwell, las cuales tienden a cero en infinito y cumplen las condiciones de frontera adecuadas.

1.7.2. Procedimiento numérico

Debido al carácter vectorial de las Ecs. (1.277), (1.281) y (1.286), y junto con la Ec. (1.276) se tiene un sistema de ocho ecuaciones lineales integrales de superficie, con ocho funciones complejas desconocidas que dependen de la coordenada \vec{s} en la interfaz. Las cantidades complejas son $\sigma_j(\vec{s})$ y $\vec{h}_j(\vec{s})$ para $j = 1, 2$. Las ecuaciones que se mencionan, derivadas en la Sec. 1.7.1, son

$$\begin{aligned} \phi_2^{ext} - \phi_1^{ext} &= G_1 \sigma_1 - G_2 \sigma_2, \\ \vec{A}_2^{ext} - \vec{A}_1^{ext} &= G_1 \vec{h}_1 - G_2 \vec{h}_2, \\ H_1 \vec{h}_1 - H_2 \vec{h}_2 - i\omega \vec{n}_s (G_1 \epsilon_1 \mu_1 \sigma_1 - G_2 \epsilon_2 \mu_2 \sigma_2) &= \vec{\alpha}, \\ H_1 \epsilon_1 \sigma_1 - H_2 \epsilon_2 \sigma_2 - i\omega \vec{n}_s (G_1 \epsilon_1 \vec{h}_1 - G_2 \epsilon_2 \vec{h}_2) &= D^{ext}. \end{aligned} \quad (1.287)$$

El método consistió en discretizar las integrales de superficie involucradas en el sistema que se muestra en la Ec. (1.287). Se busca reducir la dependencia espacial de cada cantidad a un número discreto N de puntos representativos distribuidos a lo largo de la interfaz (\vec{s}_a , para $a = 1, \dots, N$). Asociado a cada uno de estos puntos se considera un elemento de frontera δS_a tal que define un mallado en la interfaz. Tanto los campos eléctrico y magnético, así como los valores de (σ_j, \vec{h}_j) , varían por una cantidad muy pequeña entre puntos contiguos del mallado, por lo que se considera que los valores de estas cantidades son casi constantes en cada elemento finito, siempre y cuando las cargas y corrientes no se apilen en la interfaz. La discretización permite representar los operadores que aparecen en el sistema de ecuaciones por matrices finitas con dimensión $N \times N$ [28]. Las cargas y corrientes en la interfaz se aproximan por vectores complejos de dimensión

N , y contienen el valor de (σ_j, \vec{h}_j) en los N puntos representativos. En el límite cuando $\vec{s} \rightarrow \vec{s}'$, las funciones tanto $H_j(\vec{s}, \vec{s}')$ como $G_j(\vec{s}, \vec{s}')$ divergen¹⁷. Sin embargo, esta es una divergencia integrable que se soluciona promediando sobre los elementos finitos en la interfaz. De forma explícita G_j y σ_j están dados por

$$G_{j,ab} = \int_{\delta S_b} d\vec{s}' G_j(|\vec{s}_a - \vec{s}'|) \quad \text{y} \quad \sigma_{j,a} = \sigma_j(\vec{s}_a),$$

donde los subíndices a y b hacen referencia a elementos de la interfaz. Los operadores en el sistema de la Ec. (1.287) se sustituyen por matrices. Por ejemplo, la función $\delta(\vec{s} - \vec{s}')$ se convierte en δ_{ab} , y tanto \vec{n}_s como ϵ_j son matrices diagonales con elementos $\vec{n}_{s_a} \delta_{ab}$ y $\epsilon_j \delta_{ab}$. Después de representar los operadores por matrices con dimensión $N \times N$, el sistema resultante involucra $8N$ ecuaciones lineales y $8N$ variables complejas, lo que implica que será necesario un tiempo de cálculo proporcional a $(8N)^3$ para resolver las matrices por inversión directa. Sin embargo, manipulando algebraicamente las matrices de $N \times N$ (como G_j) por separado, se obtiene la solución [25] al sistema de la Ec. (1.287)

$$\sigma_j = G_j^{-1} \Sigma^{-1} D^{ext} - \epsilon_{j'} \Sigma_{j'} \phi^{ext} + i\omega \vec{n}_s \cdot \Delta^{-1} [(\epsilon_1 - \epsilon_2)(\vec{\sigma} + i\omega \vec{n}_s \epsilon_{j'} \phi^{ext}) + (\epsilon_2 \Sigma_1 - \epsilon_1 \Sigma_2) \vec{A}^{ext}] \quad (1.288)$$

y

$$\vec{h}_j = G_j^{-1} \Delta^{-1} [\vec{\sigma} - \Sigma_{j'} \vec{A}^{ext} + i\omega \vec{n}_s (G_1 \epsilon_1 \sigma_1 - G_2 \epsilon_2 \sigma_2)], \quad (1.289)$$

donde

$$\begin{aligned} \phi^{ext} &= \phi_2^{ext} - \phi_1^{ext}, \quad \vec{A}^{ext} = \vec{A}_2^{ext} - \vec{A}_1^{ext}, \\ \Sigma_j &= H_j G_j^{-1}, \\ \Delta &= \Sigma_1 - \Sigma_2, \\ \Sigma &= \epsilon_1 \Sigma_1 - \epsilon_2 \Sigma_2 + \omega^2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 \vec{n}_s \cdot \Delta^{-1} \vec{n}_s, \end{aligned} \quad (1.290)$$

y $j' = 2, 1$ cuando $j = 1, 2$. Para hacer la notación más clara, la componente (ab) de la matriz $\vec{n}_s \cdot \Delta^{-1} \vec{n}_s$, en la Ec. (1.288) se lee $(\vec{n}_{S_a} \cdot \vec{n}_{S_b}) [\Delta^{-1}]_{ab}$. Las Ecs. (1.288), (1.289) y (1.290) son una herramienta útil que se utiliza para calcular soluciones analíticas a las ecuaciones de Maxwell (en geometrías como planos, esferas, cilindros o esferoides) proyectando las matrices y vectores en una base de funciones analíticas. Para evaluar las Ecs. (1.288), (1.289) y (1.290) se requieren cuatro inversiones de matrices y dos multiplicaciones de matrices, omitiendo la suma de matrices, la multiplicación por matrices diagonales y la multiplicación de matrices por vectores, las cuales requieren un tiempo de cálculo proporcional a N^2 . Por lo tanto, el tiempo de cómputo para las Ecs. (1.288), (1.289) y (1.290) es de $6N^2$.

¹⁷Las funciones $H_j(\vec{s}, \vec{s}')$ y $G_j(\vec{s}, \vec{s}')$ son evaluadas en puntos de la interfaz entre los medios. El vector \vec{s} es un punto arbitrario donde se desean conocer las cargas y corrientes (σ_j, \vec{h}_j) y depende de los demás puntos arbitrarios \vec{s}' en la frontera.

1.7.3. Elementos básicos de la teoría MNPBEM

En esta tesis se plantea el estudio de la respuesta electromagnética de metasuperficies desordenadas de nanopartículas de aluminio (NPsAl) depositadas sobre un sustrato de cuarzo. Analizando las resonancias plasmónicas para una sola nanopartícula de aluminio sobre cuarzo en función del radio, y posteriormente un dímero de nanopartículas soportados sobre cuarzo en función de la distancia, es posible argumentar la naturaleza de la resonancia plasmónica presente en los datos experimentales de absorbancia [29]. Utilizando el método numérico computacional MNPBEM (acrónimo de *Metal Nanoparticle Boundary Element Method*), se incluyen los efectos del sustrato de cuarzo en las simulaciones numéricas que resuelven las ecuaciones de Maxwell a partir del método de elemento en la frontera para nanopartículas plasmónicas soportadas sobre estructuras de capas o soportadas sobre un sustrato. Para obtener las ecuaciones del método MNPBEM se considera el caso en que se tiene un sustrato (o una estructura de capas) donde el vector normal está dado por \hat{n}_s , ver Fig. 1.13.

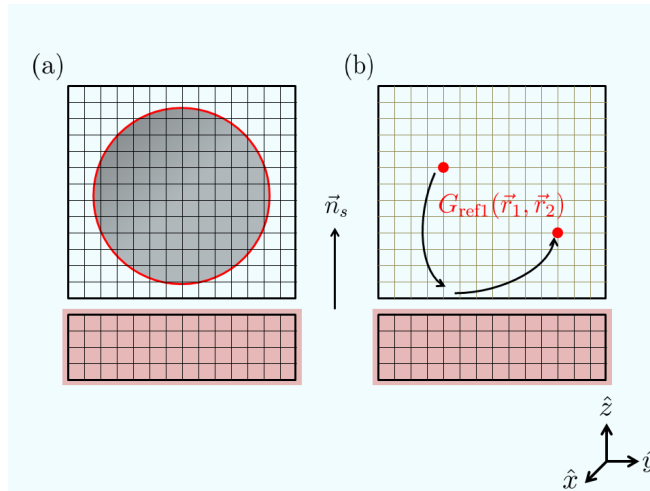


Fig. 1.13: (a) Representación esquemática de la nanopartícula soportada sobre una estructura de capa. (b) Funciones de Green calculadas en presencia del sustrato sin la nanopartícula. Imágen extraída y modificada de [28].

Análogo al método de elemento en la frontera (BEM), las Ecs. (1.265) y (1.266) siguen siendo válidas y su solución está dada por las Ecs. (1.268) y (1.269), y las cantidades σ_s y \vec{m} tienen valores distintos de cero sólo para valores en la interfaz. El método MNPBEM no utiliza cargas y corrientes (σ, \vec{m}), si no que introduce cargas y corrientes adecuadas, sujetas a las condiciones de frontera apropiadas de los campos electromagnéticos en la interfaz entre la nanopartícula y el sustrato. Asimismo, considera que todos los elementos de frontera en contacto con el sustrato son *elementos exteriores* (definidos con respecto a la normal a la superficie del sustrato e indexados con el número 2) y los elementos de frontera de la nanopartícula son *elementos interiores* (indexados con el número 1). La continuidad del potencial escalar y el potencial vectorial en la interfaz entre la nanopartícula y el sustrato, ver Ecs. (1.272) y (1.273), respectivamente, se reescriben de la

siguiente forma

$$G_1\sigma_1 + \phi_1^{ext} = G_2^{\sigma\sigma}\sigma_2 + G_2^{\sigma h}h_2^\perp + \phi_2^{ext}, \quad (1.291)$$

$$G_1\vec{h}_1^\parallel + \vec{A}_1^{\parallel ext} = G_2\vec{h}_2^\parallel + \vec{A}_2^{\parallel ext}, \quad (1.292)$$

$$G_1h_1^\perp + A_1^{\perp ext} = G_2^{hh}h_2^\perp + G_2^{h\sigma}\sigma_2 + A_2^{\perp ext}. \quad (1.293)$$

Debido a la presencia del sustrato, es necesario introducir las funciones de Green del sustrato $G_2^{\sigma\sigma}$, $G_2^{\sigma h}$, G_2^{hh} y $G_2^{h\sigma}$ que dan cuenta del acoplamiento entre la carga inducida σ_2 en la interfaz y la componente h^\perp , ver Ecs. (1.291) y (1.293), mientras que \vec{h}^\parallel no se acopla con h^\perp y σ_2 , ver Ec. (1.292).

Utilizando las Ecs. (1.264), (1.291) y (1.292) y sustituyendo en la Ec. (1.280) se obtiene [28]

$$H_1\vec{h}_1^\parallel - H_2\vec{h}_2^\parallel - i\omega\hat{n}_s^\parallel(\epsilon_1G_1\sigma_1 - \epsilon_2G_2^{\sigma\sigma}\sigma_2 - \epsilon_2G_2^{\sigma h}h_2^\perp) = \alpha^\parallel, \quad (1.294)$$

donde

$$\alpha^\parallel = (\hat{n}_s^\parallel \cdot \nabla_s)(A_1^{\parallel ext} - A_2^{\parallel ext}) + i\omega\hat{n}_s^\parallel(\epsilon_1\mu_1\phi_1^{ext} - \epsilon_2\mu_2\phi_2^{ext}).$$

De forma análoga, para el cálculo de la componente paralela, utilizando las Ecs. (1.264), (1.291) y (1.293), y sustituyendo en la Ec. (1.280), se tiene que [28]

$$H_1\vec{h}_1^\perp - H_2\vec{h}_2^\perp - H_2^{h\sigma}\sigma_2 - i\omega n_s^\perp(\epsilon_1G_1\sigma_1 - \epsilon_2G_2^{\sigma\sigma}\sigma_2 - \epsilon_2G_2^{\sigma h}h_2^\perp) = \alpha^\perp, \quad (1.295)$$

donde

$$\alpha^\perp = (n_s^\perp \cdot \nabla_s)(A_1^{\perp ext} - A_2^{\perp ext}) + i\omega n_s^\perp(\epsilon_1\mu_1\phi_1^{ext} - \epsilon_2\mu_2\phi_2^{ext}).$$

De la continuidad de la componente normal del vector de desplazamiento eléctrico, Ec. (1.274), junto con la Ec. (1.264), se tiene la siguiente expresión

$$\hat{n}_s \cdot (\epsilon_2\vec{E}_2 - \epsilon_1\vec{E}_1) = \hat{n}_s \cdot \left[\epsilon_1 \left(-\nabla_s\phi_1 + i\omega\vec{A}_1 \right) - \epsilon_2 \left(-\nabla_s\phi_2 + i\omega\vec{A}_2 \right) \right],$$

junto con la Ec. (1.295), se tiene

$$\begin{aligned} \epsilon_1H_1\sigma_1 - \epsilon_2H_2^{\sigma\sigma}\sigma_2 - \epsilon_2H_2^{\sigma h}h_2^\perp - i\omega\hat{n}_s^\parallel \cdot (\epsilon_1G_1\vec{h}_1^\parallel - \epsilon_2G_2\vec{h}_2^\parallel) \\ - i\omega n_s^\perp(\epsilon_1G_1h_1^\perp - \epsilon_2G_2^{hh}h_2^\perp - \epsilon_2G_2^{h\sigma}\sigma_2) = D^e, \end{aligned} \quad (1.296)$$

donde

$$\begin{aligned} D^e = (\hat{n}_s^\parallel \cdot \nabla_s)(\epsilon_2\phi_2 - \epsilon_1\phi_1) + i\omega\hat{n}_s^\parallel \cdot (\epsilon_2\vec{A}_2 - \epsilon_1\vec{A}_1) + (n_s^\perp \cdot \nabla_s)(\epsilon_2\phi_2 - \epsilon_1\phi_1) \\ + i\omega n_s^\perp (\epsilon_2A_2^{\perp ext} - \epsilon_1A_1^{\perp ext}). \end{aligned}$$

El conjunto de Ecs. (1.291) - (1.296) tiene como solución las cargas y corrientes $(\sigma_1, \vec{h}_1, \sigma_2, \vec{h}_2)$ en la interfaz. Para simplificar el conjunto de ecuaciones, se reescribe la Ec. (1.294) de la siguiente

forma

$$\begin{aligned}
 (\Sigma_1 - \Sigma_2^{\parallel})G_2^{\parallel}\vec{h}_2^{\parallel} = i\omega\hat{n}_s(\epsilon_2 - \epsilon_1)(G_2^{\sigma\sigma}\sigma_2 + H_2^{\sigma h}h_2^{\perp}) + \alpha^{\parallel} - \Sigma_1(\vec{A}_2^{\parallel ext} - \vec{A}_1^{\parallel ext}) \\
 + i\omega\hat{n}_s^{\parallel}(\phi_2^{ext} - \phi_1^{ext}), \tag{1.297}
 \end{aligned}$$

donde $\Sigma_i = H_i G_i^{-1}$. La Ec. (1.297) expresa a \vec{h}_2^{\parallel} en términos de h_2^{\perp} y σ_2 lo que permite reescribir el cuarto y quinto término de la Ec. (1.296), respectivamente, como

$$\begin{aligned}
 i\omega n_s^{\perp} \left\{ \epsilon_1 \left[G_2^{h\sigma}\sigma_2 + G_2^{hh}h_2^{\perp} + (A_2^{\perp ext} - A_1^{\perp ext}) \right] - \epsilon_2(G_2^{h\sigma}\sigma_2 + G_2^{hh}h_2^{\perp}) \right\} = \\
 i\omega n_s^{\perp}(\epsilon_1 - \epsilon_2)(G_2^{h\sigma}\sigma_2 + G_2^{hh}h_2^{\perp}) + i\omega n_s^{\perp}(A_2^{\perp ext} - A_1^{\perp ext}), \tag{1.298}
 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 i\omega\hat{n}_s^{\parallel} \cdot (\epsilon_1 G_1^{\parallel}\vec{h}_1^{\parallel} - \epsilon_2 G_2^{\parallel}\vec{h}_2^{\parallel}) = n_s^{\perp} \cdot i\omega(\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(\Sigma_1 - \Sigma_2^{\parallel} \right)^{-1} \left[i\omega\hat{n}_s^{\parallel}(\epsilon_1 - \epsilon_2)(G_2^{\sigma\sigma}\sigma_2 + G_2^{\sigma h}h_2^{\perp}) + \bar{\alpha} \right] \\
 + i\omega\hat{n}_s^{\parallel} \cdot \epsilon_1(\vec{A}_2^{\parallel ext} - \vec{A}_1^{\parallel ext}). \tag{1.299}
 \end{aligned}$$

donde $\bar{\alpha} = \alpha - \Sigma_1(\vec{A}_2 - \vec{A}_1) + i\omega\vec{n}_s\epsilon(\phi_2 - \phi_1)$. Finalmente, utilizando las Ecs. (1.297) - (1.299), la Ec. (1.296) se reescribe como

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_1 \Sigma_1 G_2^{\sigma\sigma})\sigma_2 + (\epsilon_1 \Sigma_1 G_2^{\sigma h})h_2^{\perp} - ik\vec{n}_s^{\parallel}(\epsilon_1 - \epsilon_2)(G_2^{\sigma\sigma}\sigma_2 + G_2^{\sigma h}h_2^{\perp}) \\
 - i\omega n_s^{\perp}(\epsilon_1 - \epsilon_2)(G_2^{h\sigma}\sigma_2 + G_2^{hh}h_2^{\perp}) = D^e - \epsilon_1 \Sigma_1 \varphi \\
 + i\omega\vec{n} \cdot \epsilon_1 \vec{a} + \vec{n}^{\parallel} \cdot \Gamma(\bar{\alpha}^{\parallel} - \Sigma_1 \vec{a}^{\parallel} + ik\vec{n}^{\parallel}\epsilon_1 \varphi), \tag{1.300}
 \end{aligned}$$

donde $\Gamma = (\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(\Sigma_1 - \Sigma_2^{\parallel} \right)^{-1}$. Por otra parte, la Ec. (1.295) se reescribe como

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_1 \Sigma_1 G_2^{\sigma\sigma} - H_2^{h\sigma})\sigma_2 + (\Sigma_1 G_2^{hh} - H_2^{hh})h_2^{\perp} - i\omega n^{\perp}(\epsilon_1 - \epsilon_2)(G_2^{\sigma\sigma}\sigma_2 + G_2^{\sigma h}h_2^{\perp}) = \\
 \alpha^{\perp} - \Sigma_1(A_2^{\perp ext} - A_1^{\perp ext}) + i\omega n^{\perp}\epsilon_1\varphi, \tag{1.301}
 \end{aligned}$$

donde $\Sigma_1 = H_1 G_1^{-1}$, $\Sigma_2 = H_1 G_2^{\parallel-1}$. El conjunto de Ecs. (1.300) y (1.301) se puede considerar como una ecuación matricial que resuelve los valores (σ_2, h_2^{\perp}) mediante inversión de matrices. Una vez que se cuenta con los valores σ_2 y h_2^{\perp} , se sustituyen en la Ec. (1.297) y se obtiene el valor de \vec{h}_2^{\parallel} . Los valores de σ_1 y \vec{h}_1 se obtienen de las Ecs. (1.291) - (1.293), a partir de los valores de (σ_2, h_2^{\perp}) .

A partir de los métodos computacionales BEM y MNPBEM, se pueden calcular las secciones transversales de esparcimiento, ver Sec. 1.6, para diferentes geometrías. En particular, las geometrías que se consideran en este trabajo son: una nanopartícula de aluminio soportada en un sustrato de cuarzo, así como un dímero de nanopartículas de aluminio soportado en cuarzo. Con todo lo anterior, se tiene toda la herramienta matemática y numérica necesaria para calcular las propiedades ópticas del sistema monocapa descrito en la Sec. 1.3.

Características de las muestras previamente fabricadas

Las monocapas desordenadas de nanopartículas de aluminio depositadas sobre cuarzo con una distribución de tamaños de nanopartícula menor a los 10 nm y una separación promedio entre partículas de 1 nm, fueron fabricaron con el método de pulverización catódica en el Insituto de Física de la UNAM por el grupo del Dr. Rodríguez-Gómez. A continuación se describe la metodología experimental para la fabricación y caracterización óptica de las monocapas de nanopartículas de aluminio con resonancias plasmónicas bien definidas en el ultravioleta lejano [29].

2.1. Fabricación de muestras

Las monocapas de nanopartículas de aluminio se fabricaron empleando una cámara de pulverización catódica con corriente directa (DC), la cual opera con gas de argón y un blanco de aluminio con 99.99 % de pureza. La Fig. 2.1 muestra el esquema del diseño de la cámara de pulverización catódica, desarrollada por el Dr. Rodríguez-Gómez en el Instituto de Física de la UNAM y fue ensamblado por MVS Inc. Company (Colorado, EEUU). La cámara de pulverización catódica está constituida por una cámara de carga de bajo volumen y una cámara de deposición al vacío de 26,500 cm³. Para alcanzar el vacío requerido para el deposito se utiliza una bomba turbomolecular mecánica capaz de proveer una presión base de 10⁻⁶ Torr y a través de una válvula de mariposa operada por un controlador automático, es posible ajustar la presión en un rango de 10⁻⁶ Torr a 10⁻² Torr. La cámara de deposición al vacío cuenta con un tubo de cuarzo, el cual está envuelto por una bobina de cobre refrigerada por agua, responsable de la transferencia de potencia desde la fuente de radiofrecuencia al plasma. La fuente de radiofrecuencia opera a 13.56 MHz en un rango de potencia desde 0 a 500 W. Dentro de la cámara de deposición al vacío, el apoyo del sustrato es una placa de nitruro de boro controlada por un sistema que permite variar el rango de temperatura desde la temperatura ambiente hasta los 700° [29].

En la cámara de pulverización catódica se llevaron acabo depósitos de nanopartículas de aluminio sobre tres sustratos diferentes: (a) cuarzo, (b) una película de nitrocelulosa montada en una rejilla para TEM y (c) cuarzo recubierto con grafeno. La caracterización de las nanopartículas depositadas sobre películas de nitrocelulosa se llevó acabo con la técnica de microscopía de

2. CARACTERÍSTICAS DE LAS MUESTRAS PREVIAMENTE FABRICADAS

transmisión de electrones (TEM), utilizando un JEOL JEM-2010F FastTEM. Las partículas de aluminio sobre la película de celulosa también fueron analizadas con microscopía de escaneo de electrones (SEM), utilizando un microscopio de alta resolución de campo JOEL-JSM-7800F. Las imágenes obtenidas con ambas caracterizaciones fueron analizadas con el software de dominio público *ImageJ* [30].

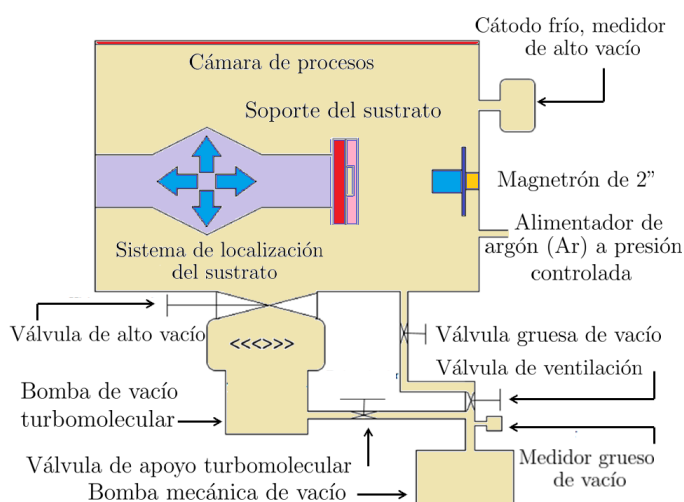


Fig. 2.1: Esquema de la cámara de pulverización catódica. Figura reproducida y modificada de [29].

Mediante la técnica de SEM se obtuvieron imágenes de las monocapas de nanopartículas de aluminio depositadas en cuarzo recubierto con grafeno, mientras que las nanopartículas de aluminio depositadas en cuarzo puro se utilizaron para mediciones espectroscópicas en la región ultravioleta-visible-infrarrojo cercano (UV-Vis-NIR), utilizando un espectrómetro Agilent Cary 500 UV-Vis-NIR equipado con una lámpara de deuterio para la sección UV, en el rango de 175 a 3,000 nm en pasos de 1 nm. Para la fabricación de las monocapas desordenadas de nanopartículas de aluminio con diámetros menores a 10 nm y separación promedio entre partículas de 1 nm, se consideraron tres parámetros de deposición: tiempo de reacción, la distancia del sustrato de cuarzo al magnetron y la posición del sustrato en el plano de deposición. Con estos parámetros optimizados fue posible reproducir sistemas monocapa con partículas de aluminio localizadas al azar en un sustrato de cuarzo. Mediante el análisis a través de imágenes de microscopía electrónica de alta resolución (HRTEM) y mediciones de absorbancia, se confirmó la alta reproducibilidad de las muestras para distintos lotes, y en los espectros de absorbancia se identificaron resonancias plasmónicas bien definidas y sin cambios en su forma.

Para la fabricación de las monocapas, la presión de operación de la cámara fue de 1.1 mTorr y la fuente de corriente directa (DC) que alimenta el magnetron, se utilizó con una potencia de 1 kWatt. Los parámetros de deposición óptimos fueron: tiempo de reacción 5 s, distancia del sustrato de cuarzo al magnetron de 13 cm, y la posición del sustrato en el plano de depósito coincidente con el centro geométrico de mayor erosión en el toroide producido por el desbaste iónico del magnetron [31]. La distribución de diámetros en las muestras fabricadas se muestra en la Fig. 2.2. La Fig. 2.2(a) corresponde a la distribución de diámetros en las muestras depositadas en sustrato de nitrocelulosa montada en una rejilla para TEM, mientras que la Fig. 2.2(b) corresponde a las muestras depositadas en sustrato de cuarzo recubierto con grafeno. Las muestras de aluminio depositadas sobre cuarzo no pueden ser analizadas mediante el método de microscopía electrónica

de alta resolución ya que la energía de los electrones desbastaría la muestra.

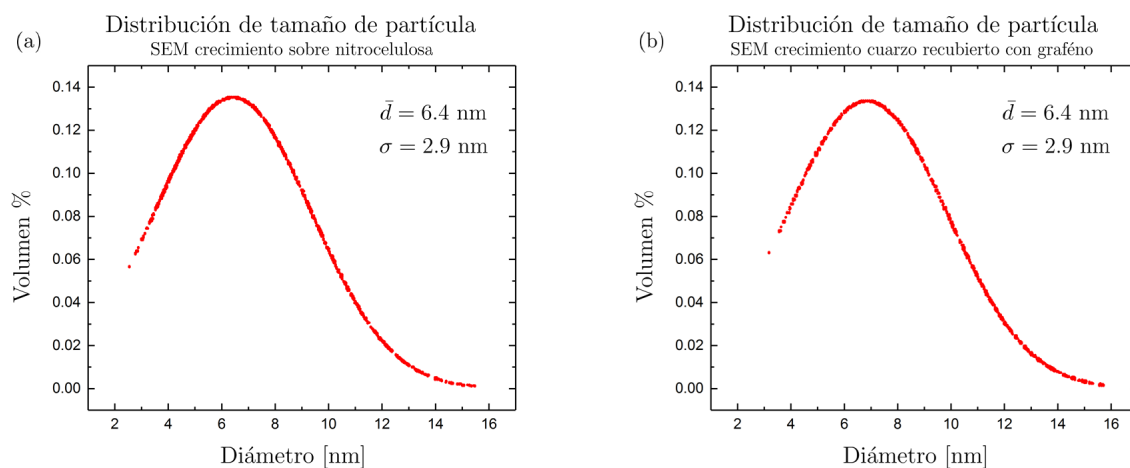


Fig. 2.2: Distribución de tamaños de las partículas de aluminio soportadas en (a) nitrocelulosa y (b) cuarzo recubierto con grafeno. Datos extraídos y adaptados de [29].

Las distribuciones de la Fig. 2.2 se obtuvieron a partir de micrografías SEM utilizando mediciones de una población de más de 1,000 partículas analizadas digitalmente. Las distribuciones log-normal en ambos sustratos confirmaron que el crecimiento de la monocapa son equivalentes. El diámetro promedio en las muestras es de $\bar{d} = 6.4 \text{ nm}$, con una desviación estándar $\sigma = 2.9 \text{ nm}$. En la Fig. 2.3, se muestran imágenes obtenidas mediante micrografías TEM de un lote de nanopartículas de aluminio sobre nitrocelulosa. Debido a la naturaleza de la técnica de escaneo TEM, la Fig. 2.3(A), aparenta ser una distribución continua sin espaciado entre las partículas, sin embargo en la Fig. 2.3(B), y a partir del análisis de imágenes, se observa que las partículas tienen una distribución uniforme cuasi esférica, con distancia promedio entre partículas $\langle D_{min} \rangle = 1 \text{ nm}$.

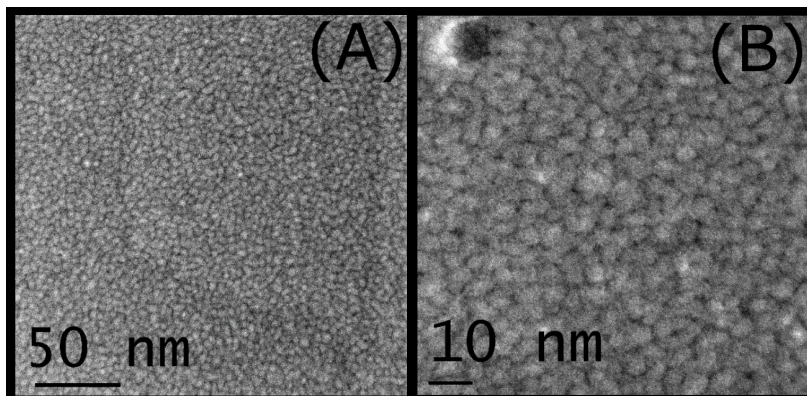


Fig. 2.3: Micrografía TEM para un conjunto de nanopartículas de aluminio depositadas en nitrocelulosa. Las barras de escala son: (A) 50 nm y (B) 10 nm. Imagen extraída y modificada de [29].

El espectro de absorción de las partículas depositadas en cuarzo se llevó a cabo en muestras aleatorias de diferentes lotes de fabricación, en el rango de 175 a 3,000 nm en pasos de 1 nm, ver Fig. 2.4.

2. CARACTERÍSTICAS DE LAS MUESTRAS PREVIAMENTE FABRICADAS

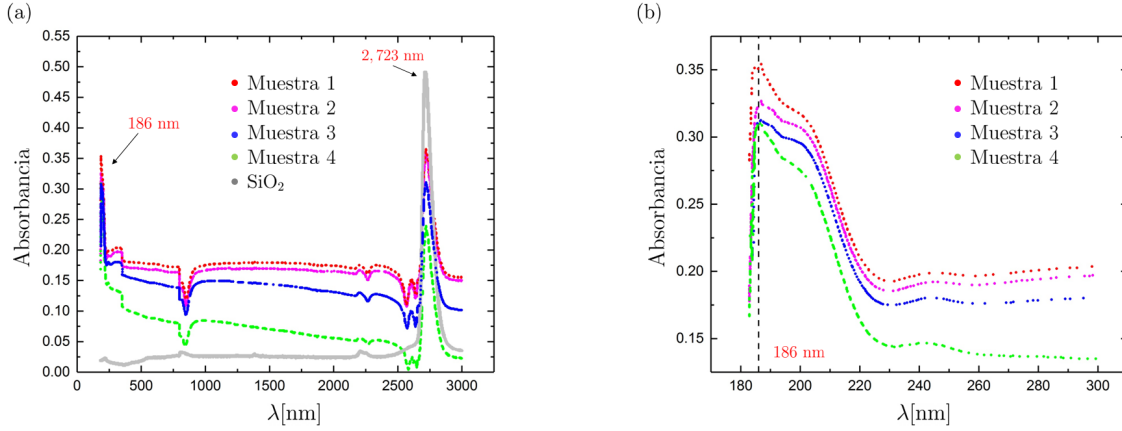


Fig. 2.4: Espectros de absorbancia de cuatro muestras escogidas al azar de un lote de monocapas de aluminio fabricadas en diferentes corridas. (a) Se observa una resonancia bien definida en $\lambda = 186$ nm para las cuatro muestras. También se observa un máximo de absorbancia en $\lambda = 2,723$ nm correspondiente al sustrato de cuarzo (SiO₂) donde están localizadas las nanopartículas. (b) Espectros de absorbancia de las cuatro muestras escogidas al azar en el intervalo $\Delta\lambda = (180 - 300)$ nm. Datos extraídos de [29].

En la Fig. 2.4, se muestran los espectros de absorbancia de 4 muestras elegidas al azar de distintos lotes de monocapas de aluminio fabricadas en distintas corridas de producción. En la Fig. 2.4(a), se observa el espectro de absorbancia en el intervalo de 175 a 3,000 nm, el cual muestra un máximo de absorción en 186 nm en todos los espectros, así como el máximo localizado en 2,723 nm, correspondiente a la absorbancia del cuarzo sin partículas de aluminio. En la Fig. 2.4(b), se muestran las mismas mediciones de absorbancia en el rango de 180 a 300 nm. El máximo de absorbancia bien definido en 186 nm tiene una anchura a media altura de 30 nm.

Con la metodología reportada por el Dr. Rodríguez-Gómez et al. [29], se logra la conformación exitosa de monocapas, término que hace referencia a: (a) una formación esférica o esferoide de las nanopartículas, (b) una distribución aleatoria, (c) diámetros de partícula variables siempre menor a 10 nm, y (d) distancia variable entre partículas sin aglomeraciones. En la publicación [29] se afirma que el máximo de absorbancia es localizado en $\lambda = 186$ nm, UV profundo, se debe al modo plasmónico dipolar de las nanopartículas individuales que conforman la monocapa.

Utilizando el modelo dipolar, ver Sec. 1.3, en este trabajo de tesis de licenciatura se modela la respuesta efectiva del medio que contiene a las nanopartículas embebidas en una matriz de aire. Los parámetros relevantes que se utilizan para el modelo dipolar son: radio promedio de partícula $a = 3.2$ nm, distancia de separación promedio entre partículas $\langle D_{min} \rangle = 1$ nm, ángulo de incidencia $\theta_i = 0^\circ$, fracción de cubierta en el intervalo $\Delta\Theta = (0.47 - 0.64)$ y longitud de onda de la onda electromagnética incidente en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm.

Resultados

La motivación de esta tesis es determinar el origen del máximo de absorbancia observado experimentalmente en $\lambda = 186$ nm en las muestras fabricadas por el Dr. Rodríguez-Gómez et al. [29]. El punto de partida es el cálculo de la absorbancia, Ec. (1.194), de un sistema monocapa desordenado de nanopartículas de aluminio con radios menores que 10 nm y con una distancia de separación promedio $\langle D_{min} \rangle = 1$ nm, soportadas en cuarzo (SiO_2); el sistema es iluminado por una onda electromagnética en configuración externa a incidencia normal. Para saber si el máximo de absorción se debe al modo plasmónico dipolar de una partícula aislada, como se especula en la referencia [29], es relevante el análisis de las resonancias plasmónicas de una nanopartícula de aluminio aislada y soportada en cuarzo, en función del radio. Por otra parte, para conocer el efecto de la variación de la distancia entre partículas se realiza un análisis de las resonancias plasmónicas de un dímero de nanopartículas de aluminio soportadas sobre cuarzo en función de la distancia de separación del dímero.

En este capítulo, con el propósito de conocer cuál es el efecto del sustrato en la respuesta plasmónica de una nanopartícula esférica de aluminio, se utiliza el método computacional BEM y MNPBEM, ver Sec. 1.7, así como la Teoría de Mie, ver Sec. 1.6, para calcular la respuesta de una nanopartícula esférica de aluminio tanto en el caso aislado y como en el caso cuando está soportada sobre un sustrato de cuarzo. Posteriormente, debido a que la monocapa descrita en el Cap. 2 tiene una distribución log-normal de radios centrado en el valor $a = 3.2$ nm, ver Fig. 2.2, se utiliza el método computacional MNPBEM para calcular las eficiencias de absorción C_{abs} , extinción C_{ext} y esparcimiento C_{scat} , ver Sec. 1.6, tanto de las nanopartículas esféricas de aluminio aisladas como soportadas sobre un sustrato, dentro del intervalo de distribución de radio $\Delta a = (1.75 - 4.5)$ nm. A partir de los resultados obtenidos, es posible conocer en qué intervalo de longitudes de onda la nanopartícula aislada con dimensiones menores a 10 nm presenta plasmones de superficie localizados. Para analizar el efecto de la separación promedio entre partículas, se utiliza el método computacional MNPBEM, ver Sec. 1.7.3, para calcular las secciones transversales de absorción, extinción y esparcimiento, ver Sec. 1.6, tanto de un dímero de nanopartículas esféricas de aluminio aislado, como de un dímero en presencia de un sustrato, en función de la distancia de separación entre las nanopartículas en el intervalo $\Delta d = (0.5 - 13)$ nm. Finalmente, como el sistema monocapa de estudio descrito en el Cap. 2, se conforma por tres medios: el primer medio es aire, el segundo medio es la monocapa de nanopartículas de aluminio embebidas en aire y el tercer medio es el sustrato de cuarzo (SiO_2), utilizando el modelo dipolar, ver Sec. 1.3, se calcula la respuesta efectiva del segundo medio que contiene a la monocapa embebida en aire y utilizando la formula de Landau-Lifshitz descrita en la Sec. 1.2.1, se calcula la

3. RESULTADOS

reflectancia, transmitancia y posteriormente la absorción y absorbancia del sistema monocapa iluminada en configuración externa.

3.1. Nanopartícula de aluminio aislada

Las eficiencias de extinción, absorción y esparcimiento de una nanopartícula de aluminio aislada con radio $a = 3.2$ nm se muestran en la Fig. 3.1.

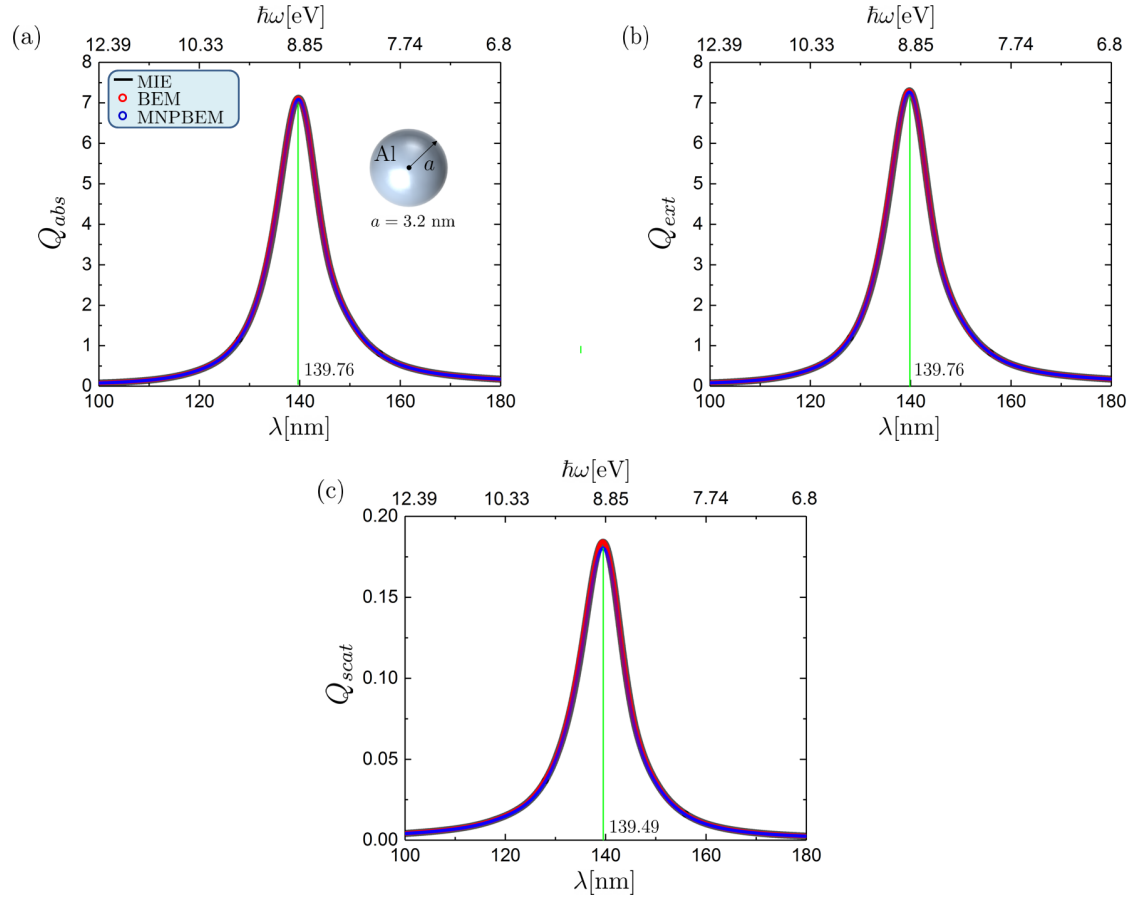


Fig. 3.1: Eficiencias de (a) absorción Q_{abs} , (b) extinción Q_{ext} y (c) esparcimiento Q_{scat} en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 180)$ nm, para una nanopartícula de aluminio con radio $a = 3.2$ nm, aislada. Los puntos rojos y azules corresponden a los cálculos numéricos con BEM y MNPBEM, respectivamente, mientras que la línea negra corresponde al resultado analítico obtenido a partir de la solución de Mie.

Las gráficas de la Fig. 3.1 se calcularon con los métodos numéricos computacionales BEM (puntos rojos) y MNPBEM (puntos azules), así como con la expresión analítica calculada con la solución de Mie (línea negra) para Q_{abs} , Q_{ext} y Q_{scat} de una nanopartícula de aluminio aislada con radio $a = 3.2$ nm. Se observa que los resultados computacionales coinciden con el dado por la expresión analítica de Mie. Tanto los métodos numéricos como el método analítico, dependen de la función

dieléctrica calculada en el Sec. 1.4, ver Ec. (1.192),

$$\epsilon_{\text{Tot}}(\omega, a) = \epsilon_{\text{bulto}}(\omega) + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma + i\omega\Delta\gamma(a)},$$

con

$$\Delta\gamma(a) = A \frac{\nu_F}{a},$$

donde ω es la frecuencia angular, a es el radio de la nanopartícula, ω_p es la frecuencia de plasma, γ es la constante de amortiguamiento, $\Delta\gamma(a)$ es la contribución adicional a γ debido a la corrección por tamaño, A es la constante de metal y ν_F es la velocidad de Fermi para el aluminio. Para el caso de una nanopartícula aislada con dimensiones menores a 10 nm, los parámetros utilizados en la Ec. (1.192) son: $\hbar\omega_p = (15.60 \pm 0.01 \%)$ eV, $\hbar\gamma = (0.59 \pm 0.5 \%)$ eV, $A = 0.5$, y $\nu_F = 2.03 \times 10^{15}$ nm/s. Los valores de $\hbar\gamma$ y $\hbar\omega_p$ se calculan a partir del método descrito en el Sec. 1.4, y sólo son válidos en el intervalo $\Delta\lambda = (72 - 400)$ nm. La función dieléctrica corregida por tamaño ϵ_{Tot} , se calcula a partir de los datos experimentales de la función dieléctrica de bulto ϵ_{bulto} obtenidos por Shiles et al. [20], en el intervalo $\Delta\lambda = (72 - 400)$ nm.

De la Fig. 3.1, se observa que la eficiencia de absorción y extinción son un orden de magnitud mayor que la eficiencia de esparcimiento. Dado que las NPs de aluminio son muy pequeñas, los mecanismos de extinción de la luz incidente en la nanopartícula de aluminio están dominados por procesos de absorción. La contribución multipolar dominante en las NPs de aluminio es la dipolar, ver Sec. 3.4, y la resonancia está localizada en $\lambda_{\text{dip}}^{\text{scat}} = 139.49$ nm para la eficiencia de esparcimiento Q_{scat} y $\lambda_{\text{dip}}^{\text{abs}} = 139.7$ nm para las eficiencias de absorción Q_{abs} y de extinción Q_{ext} . De los resultados obtenidos, se observa que los modelos computacionales BEM y MNPBEM se ajustan bien al modelo analítico, por lo que se gana confianza para hacer uso de ellos para estudiar la respuesta electromagnética de una nanopartícula de aluminio aislada y soportada sobre un sustrato.

3.1.1. Variación del radio de la nanopartícula de aluminio aislada y sobre un sustrato

Dado que en las muestras estudiadas experimentalmente en [29] se observa una variación del radio en el intervalo $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ nm, es relevante analizar las propiedades ópticas de las NPs en el intervalo de longitudes de onda $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm, para valores del radio en el intervalo Δa . A partir del cálculo de las eficiencias de absorción, extinción y esparcimiento, es posible identificar el intervalo de longitudes de onda centrales $\Delta\lambda_0$ dentro del cual están contenidas las resonancias para la distribución de radios. Dentro del intervalo Δa , las dimensiones de la partícula siguen siendo menores a longitud de camino libre medio del aluminio $l_\infty = 18.9$ nm [32], por lo que es necesario calcular la función dieléctrica ϵ_{Tot} corregida por tamaño en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm, para cada uno de los valores de radio que estén en el intervalo Δa . La Fig. 3.2 muestra los valores calculados con BEM de Q_{ext} , Q_{scat} y Q_{abs} dependientes del radio de la nanopartícula en el intervalo Δa . Los valores de radio utilizados fueron $a = (1.75, 1.80, 1.85, 1.90, 1.95, 2.00, 3.0, 3.2, 4.0, 4.5, 4.65)$ nm. En las Figs. 3.2(a) y 3.2(b), se observa que el espectro de absorción y extinción se angostan y tanto el valor máximo de Q_{abs} como de Q_{ext} se incrementan conforme el radio de la nanopartícula

3. RESULTADOS

aumenta. Para todos los radios dentro del intervalo Δa , Q_{scat} , ver Fig. 3.2(c), es un orden de magnitud menor que Q_{abs} y Q_{ext} , en consecuencia los mecanismos de extinción se deben principalmente a procesos de absorción. La longitud de resonancia asociada a la contribución dipolar en cada uno de los espectros calculados se recorre a longitudes de onda mayores conforme el radio de la nanopartícula aumenta.

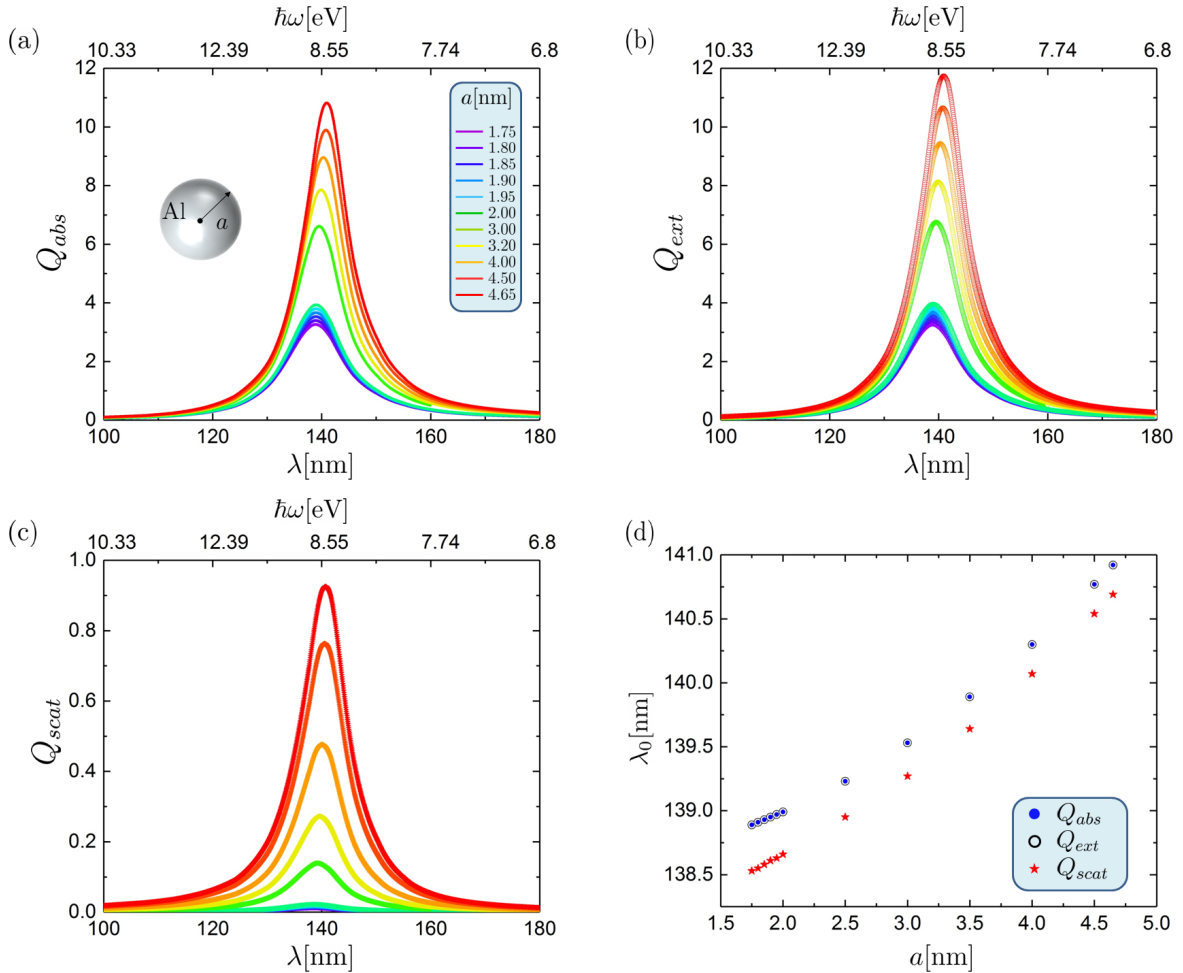


Fig. 3.2: Eficiencias de (a) absorción, (b) extinción y (c) esparcimiento para una nanopartícula de aluminio aislada en función del radio a de la nanopartícula. (d) Máximo de cada una de las eficiencias en función del radio a de la nanopartícula.

La Fig. 3.2(d) muestra la longitud de onda de los máximos de Q_{ext} , Q_{scat} y Q_{abs} en función del radio de la nanopartícula. Las estrellas rojas corresponden a Q_{scat} , los puntos azules a Q_{abs} y los círculos negros a Q_{ext} ; dado que el esparcimiento es muy pequeño, prácticamente la absorción coincide con la extinción, por lo cual los puntos azules y círculos negros están sobrepuestos en la Fig. 3.2(d). El corrimiento hacia el rojo de la resonancia plasmónica dipolar de las nanopartículas es creciente conforme el radio de la nanopartícula crece. En el caso de Q_{ext} y Q_{abs} la resonancia se recorre hacia el rojo $\delta\lambda_0 = 2.03$ nm, mientras que para Q_{scat} $\delta\lambda_0 = 2.16$ nm, en el intervalo $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ nm.

Utilizando el método numérico MNPBEM, se obtuvieron los coeficientes de C_{ext} , C_{scat} y C_{abs}

dependientes del radio de la nanopartícula en el mismo intervalo Δa , para una nanopartícula de aluminio esférica soportada sobre cuarzo (SiO_2). La Fig. 3.3, muestra la función dieléctrica del SiO_2 obtenida experimentalmente y reportada en [20], en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm.

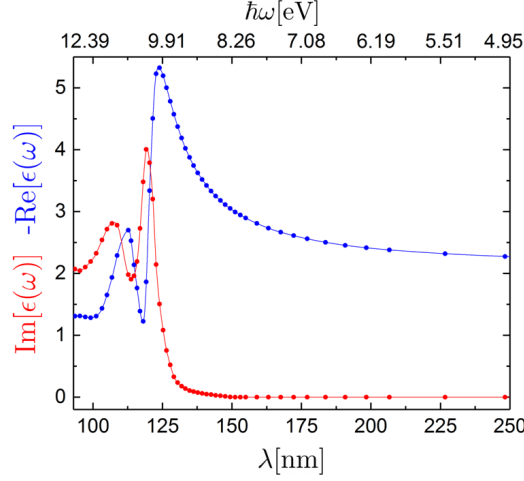


Fig. 3.3: Función dieléctrica del dióxido de silicio, SiO_2 , obtenida de [20], en función tanto de la longitud de onda, como de la energía (escala superior).

De la Fig. 3.3, se observa que la parte imaginaria de la función dieléctrica del SiO_2 , asociada a los mecanismos de absorción, comienzan a ser relevante para longitudes de onda menores a $\lambda = 137$ nm (mayores a 9 eV), mientras que para valores mayores a esta longitud de onda los mecanismos de absorción del SiO_2 son despreciables.

La Fig. 3.4 muestra los valores calculados con MNPBEM de $C_{ext}/(\pi a^2)$, $C_{scat}/(\pi a^2)$ y $C_{abs}/(\pi a^2)$ dependientes del radio de la nanopartícula soportada sobre un sustrato de cuarzo en el intervalo Δa . Los valores de las secciones transversales son normalizados por el valor πa^2 , con la finalidad de poder comparar con los resultados obtenidos para los valores de $Q_{ext}(a)$, $Q_{scat}(a)$ y $Q_{abs}(a)$ de una nanopartícula de aluminio aislada, ver Fig. 3.2. En el intervalo Δa , la longitud del máximo λ_0 de todas las secciones transversales se recorre a longitudes de onda mayores conforme el radio de la nanopartícula aumenta. En todas las secciones transversales se observa la aparición de nuevas contribuciones multipolares debidas a la interacción entre el sustrato y la nanopartícula [33]. Tanto la Fig. 3.4(a) y (b), muestran los valores de $C_{abs}/(\pi a^2)$ y $C_{ext}/(\pi a^2)$, respectivamente, donde se observa que los mecanismos de disipación de energía incrementan conforme el radio de la nanopartícula aumenta, así como la interacción de la nanopartícula con el sustrato de SiO_2 [33]. En la Fig. 3.4(c) se observa que la sección transversal de esparcimiento es un orden de magnitud menor que las secciones transversales de extinción y absorción, por lo que los mecanismos de extinción de las nanopartículas de aluminio soportadas en cuarzo también son consecuencia en mayor medida a la absorción. La Fig. 3.4(d) muestra la longitud de onda del máximo de cada una de las secciones transversales $C_{ext}/(\pi a^2)$, $C_{scat}/(\pi a^2)$ y $C_{abs}/(\pi a^2)$ en función del radio de la nanopartícula de aluminio, en el intervalo de radios Δa . Se observa que el corrimiento de la resonancia plasmónica principal de la nanopartícula de aluminio sobre un sustrato de cuarzo es creciente conforme el radio de la nanopartícula aumenta. Este corrimiento abarca el intervalo¹⁶

¹⁶El subíndice S hace referencia a los datos obtenidos con la presencia de un sustrato de SiO_2 .

3. RESULTADOS

$\Delta_S \lambda_0 = (144.5 - 148.6)$ nm para $C_{scat}/(\pi a^2)$, y tiene un valor $\delta_S \lambda_0 = 4.1$ nm, mientras que para $C_{abs}/(\pi a^2)$ y $C_{ext}/(\pi a^2)$ el corrimiento está localizado en el intervalo $\Delta_S \lambda_0 = (144.5 - 148.9)$ nm y tienen un valor $\delta_S \lambda_0 = 4.4$ nm.

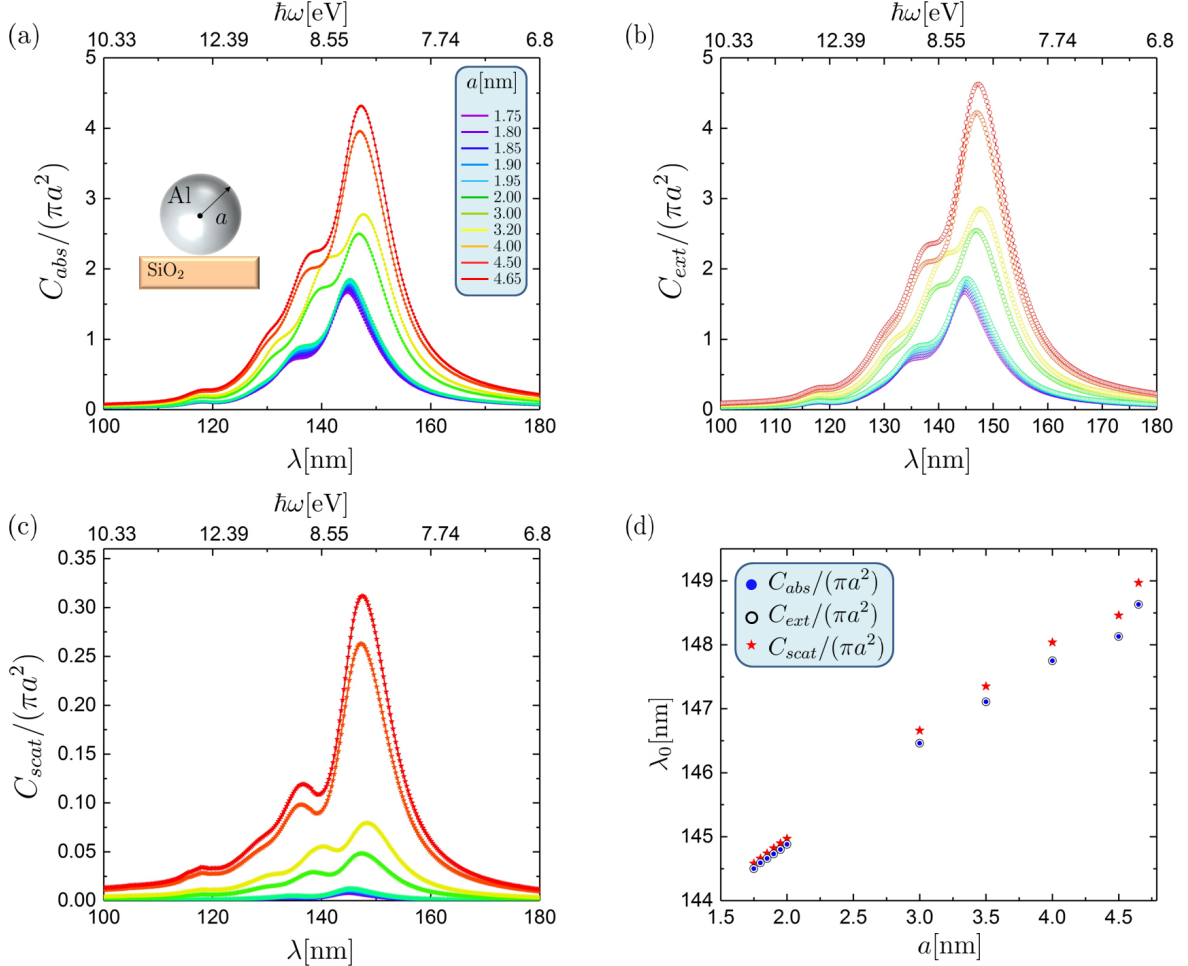


Fig. 3.4: Eficiencias de (a) absorción, (b) extinción y (c) esparcimiento para una nanopartícula de aluminio soportada en un sustrato de cuarzo en función del radio a de la nanopartícula. (d) Máximo de cada una de las eficiencias en función del radio a de la nanopartícula.

Al comparar los valores de las resonancias plasmónicas de una nanopartícula de aluminio aislada y sobre un sustrato en función del radio [ver Figs. 3.2(d) y 3.4(d)], en el intervalo Δa , se observa que la presencia del sustrato de SiO₂ induce un corrimiento mayor de las longitudes de onda centrales hacia el rojo de $\delta_S \lambda_0 = 4.13$ nm, comparado al corrimiento hacia el rojo de una nanopartícula aislada de $\delta \lambda_0 = 2.03$ nm. Asimismo, los espectros de una nanopartícula de aluminio soportada sobre SiO₂ en función del radio, presentan una estructura más rica comparada a los espectros de la misma nanopartícula de aluminio aislada, debido a la interacción de la nanopartícula con el sustrato.

A partir del análisis realizado se muestran los efectos que tiene el sustrato de SiO₂ en la respuesta óptica de la nanopartícula de aluminio con dimensiones menores a 10 nm. Las resonancias plasmónicas de la nanopartícula soportada en cuarzo ocurren a longitudes de onda mayores

(energías menores) comparadas a las resonancias de la nanopartícula aislada para un radio a en el intervalo Δa .

3.2. Dímero de nanopartículas de aluminio

Cuando dos partículas esféricas están cercanas una de la otra, su respuesta óptica se modifica [34], y dado que en las muestras de monocapas fabricadas por el Dr. Rodríguez-Gómez et al. la distancia promedio entre partículas es de 1 nm, a continuación se realiza un análisis tanto de la respuesta óptica de un dímero de nanopartículas de aluminio aislado, como de un dímero de nanopartículas sobre un sustrato de cuarzo en función de la distancia de separación d ; el radio de las nanopartículas de aluminio del dímero es $a = 3.2$ nm. En el intervalo de distribución de tamaño de las nanopartículas de aluminio fabricadas por Rodríguez-Gómez et al., el valor $a = 3.2$ nm corresponde al máximo de la distribución log-normal, ver Fig. 2.2.

3.2.1. Propiedades ópticas de un dímero de nanopartículas de aluminio aislado y sobre un sustrato

Las secciones transversales del dímero de nanopartículas de aluminio se calcularon con el método MNPBEM, en función de la distancia de separación d entre las nanopartículas de aluminio, en el intervalo de distancias $\Delta d = (0.5 - 13)$ nm. Los valores en el intervalo Δd son de interés ya que para valores menores a $d = 0.5$ nm el efecto túnel de los electrones de conducción contribuye a la respuesta electromagnética del dímero [34], mientras que para valores cercanos a $d = 13$ nm se recupera la resonancia plasmónica asociada a la nanopartícula de aluminio aislada. Las líneas verticales rojas en la Fig. 3.5, indican la longitud de onda del máximo para $d = 13$ nm, para el cual se recupera el caso de una NP de aluminio aislada. En la Fig. 3.5(d) las líneas horizontales muestran los valores correspondientes a los máximos de C_{abs} y C_{ext} (línea azul) y C_{scat} (línea roja) para una nanopartícula de aluminio aislada.

La Fig. 3.5 muestra las secciones transversales C_{ext} , C_{abs} y C_{scat} para el dímero de nanopartículas aislado (sin sustrato). Los máximos de los espectros de C_{ext} , C_{abs} y C_{scat} se recorren a longitudes de onda mayores conforme la distancia entre las nanopartículas d aumenta en el intervalo Δd . Mientras que C_{scat} tiene un máximo de intensidad para $d = 3.0$ nm, el máximo de C_{abs} y C_{ext} crece monótonamente conforme la separación entre partículas d aumenta en el intervalo Δd . Al disminuir la distancia de separación del dímero de aluminio, los espectros de sección transversal de absorción, extinción y esparcimiento se ensanchan. Los valores de C_{scat} , ver Fig. 3.5(c), son un orden de magnitud menor que C_{abs} y C_{ext} , por lo que los mecanismos de extinción son ocasionados principalmente por mecanismos de absorción de luz dentro las nanopartículas. La Fig. 3.5(d) muestra los máximos de C_{ext} , C_{scat} y C_{abs} en función de la distancia de separación entre nanopartículas; los círculos negros corresponden a C_{ext} , las estrellas rojas a C_{scat} y los puntos azules a C_{abs} . En el caso de C_{ext} y C_{abs} la resonancia se recorre hacia el rojo¹⁷ $\delta^d \lambda_0^d = 4.1$ nm, en el intervalo $\Delta^d \lambda_0^d = (135.5 - 139.6)$ nm, mientras que para C_{scat} $\delta^d \lambda_0^d = 4$ nm, en el intervalo $\Delta \lambda_0^d = (135.25 - 139.25)$ nm.

¹⁷El superíndice d hace referencia a los datos obtenidos para el dímero.

3. RESULTADOS

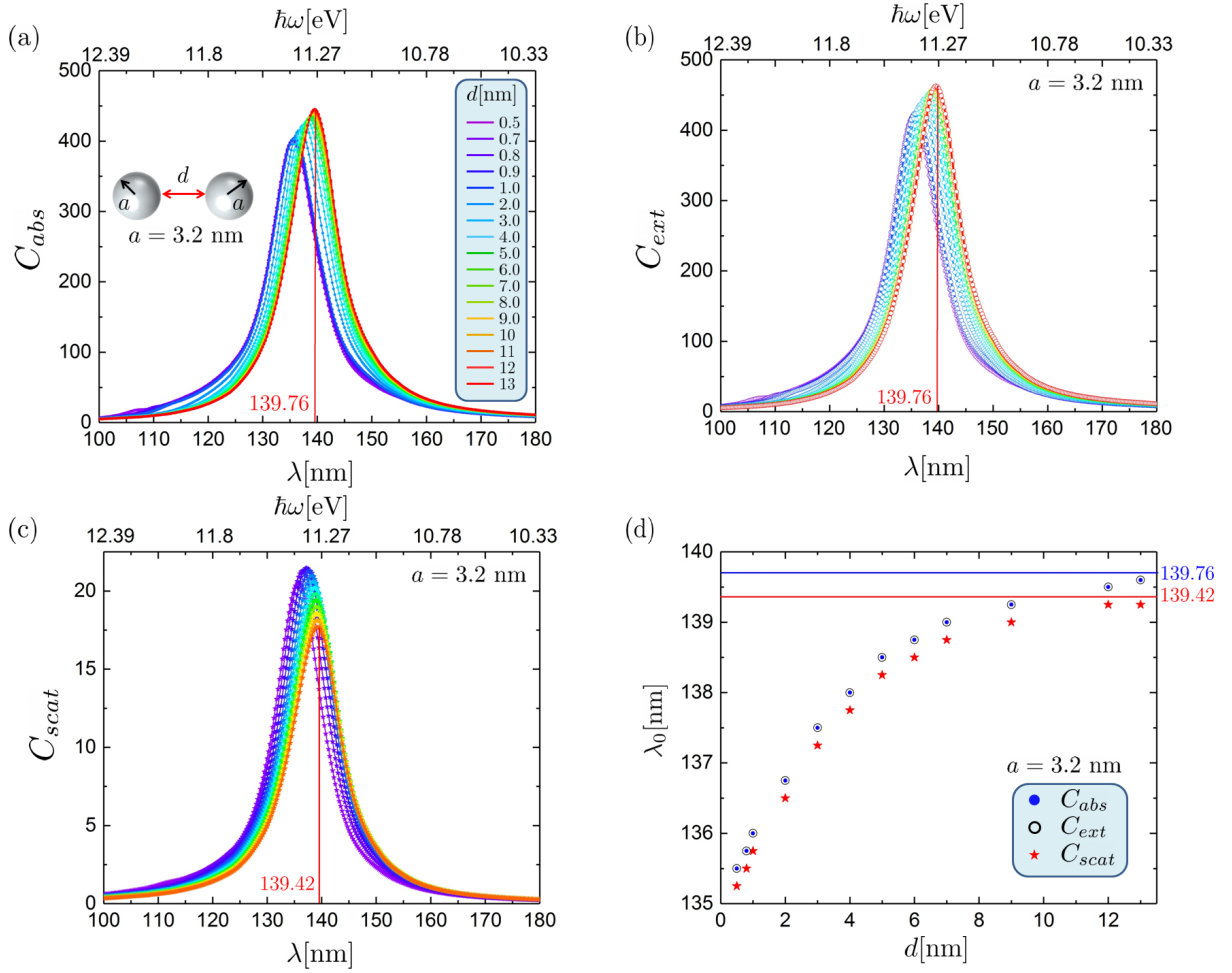


Fig. 3.5: Secciones transversales de (a) absorción, (b) extinción y (c) esparcimiento para un dímero de nanopartículas de aluminio aislado con radio $a = 3.2$ nm, en función de la distancia de separación d de las nanopartículas. (d) Máximo asociado a la contribución multipolar principal de cada una de las secciones transversales en función de la distancia de separación d .

Para el caso de un dímero de nanopartículas de aluminio soportadas en cuarzo, en la Fig. 3.6 se muestra C_{abs} , C_{scat} y C_{ext} en función de la distancia entre nanopartículas de aluminio en el intervalo Δd , calculados con MNPBEM. Para los valores de C_{abs} , ver Fig. 3.6(a), C_{ext} , ver Fig. 3.6(b), y C_{scat} , ver Fig. 3.6(c), se observa que conforme la distancia entre partículas disminuye, el ancho del espectro aumenta y el máximo se recorre a longitudes de onda mayores. En todos los espectros, para distancias de separación d menores a 1 nm, surgen nuevas contribuciones multipolares alrededor de la longitud de onda¹⁸ $\lambda_1^d = 180$ nm. Para todas las distancias de separación dentro del intervalo Δd , C_{scat} es un orden de magnitud menor que C_{abs} y C_{ext} , en consecuencia los mecanismos de extinción se deben mayoritariamente a procesos de absorción y a la interacción del dímero con el sustrato de cuarzo [35]. La Fig. 3.6(d) muestra los máximos de C_{abs} , C_{scat} y C_{ext} en función de la distancia entre nanopartículas de aluminio, los círculos negros corresponden a C_{ext} , las estrellas rojas a C_{scat} y los puntos azules a C_{abs} . Se observa que

¹⁸El subíndice 1 hace referencia a las contribuciones multipolares adicionales a la contribución multipolar dominante λ_0^d

3.2 Dímero de nanopartículas de aluminio

el corrimiento de la resonancia plasmónica dominante de los diferentes dímeros sobre un sustrato de cuarzo se corre al azul conforme la distancia de separación aumenta.

El corrimiento del máximo asociado a la contribución multipolar principal, es diferente con y sin presencia de un sustrato de cuarzo, ver Figs. 3.5(d) y 3.6(d). Para todas las distancias de separación en el intervalo Δd , la presencia del sustrato de cuarzo en el dímero de nanopartículas recorre a longitudes de ondas mayores (energías menores) el máximo de resonancia asociados a la contribución multipolar dominante comparado al dímero sin sustrato. En presencia del sustrato de cuarzo y conforme la distancia de separación disminuye, el máximo de la contribución multipolar se recorre a longitudes de ondas mayores (energías menores), la hibridación de modos plasmónicos debido a la cercanía entre partículas tiende a energías menores debido a la interacción con el sustrato, contrario al caso del dímero de nanopartículas de aluminio sin sustrato, donde el máximo asociado a la contribución multipolar dominante se corre a longitudes de onda menores (energías mayores) conforme la distancia entre nanopartículas disminuye.

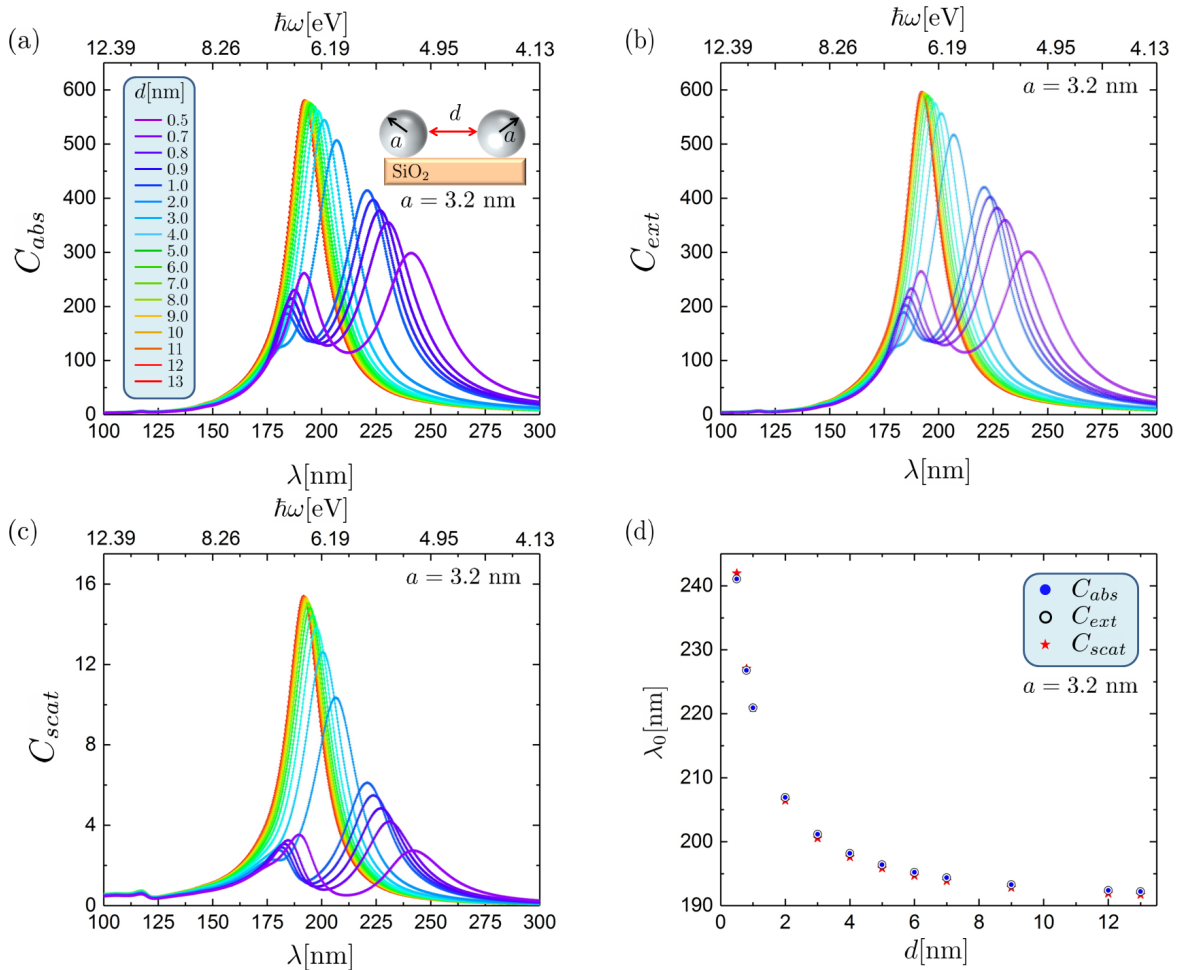


Fig. 3.6: Secciones transversales de (a) absorción, (b) extinción y (c) esparcimiento para un dímero de nanopartículas de aluminio con radio $a = 3.2$ nm, soportado sobre un sustrato de cuarzo en función de la distancia de separación d de las nanopartículas. (d) Máximo asociado a la contribución multipolar dominante de cada una de las secciones transversales en función de la distancia de separación d .

Es interesante notar que conforme la distancia en el dímero aumenta, para el caso del dímero

aislado (sin sustrato), la longitud de onda del máximo se recorre hacia el rojo, mientras que cuando el dímero está soportado sobre cuarzo se corre hacia el azul.

Para el caso del dímero soportado en cuarzo, el corrimiento abarca el intervalo $\Delta\lambda_S^d = (191.71 - 241.98)$ nm para C_{scat} , mientras que para C_{abs} y C_{ext} está en el intervalo $\Delta\lambda_S^d = (192.19 - 241.06)$ nm. Las resonancias de C_{abs} y C_{ext} se corren $\delta_S^d\lambda_0^d = 48.87$ nm, mientras que para C_{scat} se corren $\delta_S^d\lambda_0^d = 50.27$ nm.

Al comparar los valores de los intervalos en los cuales están contenidas las resonancias plasmónicas de un dímero aislado y un dímero sobre un sustrato de cuarzo, en función de la distancia de separación entre partículas, se observa que las resonancias del dímero de nanopartículas aislado se corren una cantidad $\delta^d\lambda_0^d = 4.1$ nm, mientras que para el dímero soportado en cuarzo $\delta_S^d\lambda_0^d = 50.27$ nm. Por tanto, la presencia del sustrato de cuarzo provoca un corrimiento mayor de las longitudes de onda centrales comparado al caso de un dímero de aluminio aislado, en el intervalo Δd . Las secciones transversales de un dímero de nanopartículas presentan una mayor riqueza en su estructura cuando el dímero está soportado en cuarzo, debido a la interacción entre las nanopartículas del dímero y el sustrato de cuarzo [35].

Con el análisis previo, se demuestra que la distancia entre partículas de un sistema monocapa como el descrito en el Cap. 2 afecta tanto a la posición como al espectro de absorción del dímero. Para distancias entre partículas menores a 1 nm, surgen nuevas contribuciones multipolares, debidas al fuerte acoplamiento de los campos electromagnéticos entre las partículas [34] y el sustrato de cuarzo [35], así como un corrimiento del máximo asociado a la contribución multipolar dominante λ_0^d hacia longitudes de onda mayores. Para valores mayores a 1 nm, los efectos del acoplamiento se reducen y se observa un corrimiento de la longitud de onda asociada a la contribución multipolar dominante λ_0^d hacia longitudes de onda menores.

3.3. Reflectancia y transmitancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio

Para describir la respuesta electromagnética de la monocapa descrita en la Sec. 2, se utiliza la formula de Landau-Lifshitz, ver Ecs. (1.122), (1.125), (1.130) y (1.133), para los coeficientes de reflexión y transmisión en polarización s y p , descritas en la Sec. 1.2.2

$$r_{123}^{(j)} = \frac{r_{12}^{(j)} + r_{23}^{(j)} e^{2i\beta}}{1 + r_{12}^{(j)} r_{23}^{(j)} e^{2i\beta}} \quad \text{y} \quad t_{123}^{(j)} = \frac{t_{12}^{(j)} t_{23}^{(j)} e^{i\beta}}{1 + r_{12}^{(j)} r_{23}^{(j)} e^{2i\beta}},$$

donde $j = s, p$, es la polarización de la onda electromagnética incidente, a partir de los cuales se calcula la reflectancia \mathcal{R} y transmitancia \mathcal{T} , dadas por la Ec. (1.110), del sistema monocapa desordenado de nanopartículas de aluminio en cuarzo iluminado a incidencia normal ($\theta = 0^\circ$), en configuración externa, ver Fig. (1.10), dadas por

$$\mathcal{R} = |r|^2, \quad \mathcal{T} = \frac{\wp_3}{\wp_1} |t|^2,$$

3.3 Reflectancia y transmitancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio

donde

$$\wp_1 = \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 \quad \text{y} \quad \wp_3 = \sqrt{\frac{\epsilon_3}{\mu_3}} \cos \theta_3.$$

Los coeficientes $r_{12}^{(j)}$, $r_{23}^{(j)}$ y $t_{12}^{(j)}$, $t_{23}^{(j)}$ dependen de la función dieléctrica efectiva descrita por el modelo dipolar, ver Ecs. (1.176) y (1.177). El modelo dipolar predice la respuesta electromagnética efectiva de la monocapa de nanopartículas de aluminio desordenadas, embebidas en aire y soportadas en un sustrato de SiO_2 .

Para conocer el efecto de la variación del radio de la partícula en la respuesta óptica del sistema multicapa, se calcula la reflectancia y la transmitancia en función de la longitud de onda en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$, para algunos valores de radio a dentro de $\Delta a = (1.75 - 4.65)$.

La Fig. 3.7 muestra los cálculos de \mathcal{R} y \mathcal{T} del sistema monocapa, considerando dos fracciones de cubierta $\Theta = 0.47$, ver Figs. 3.7(a) y (c), y $\Theta = 0.64$, ver Figs. 3.7(b) y (d).

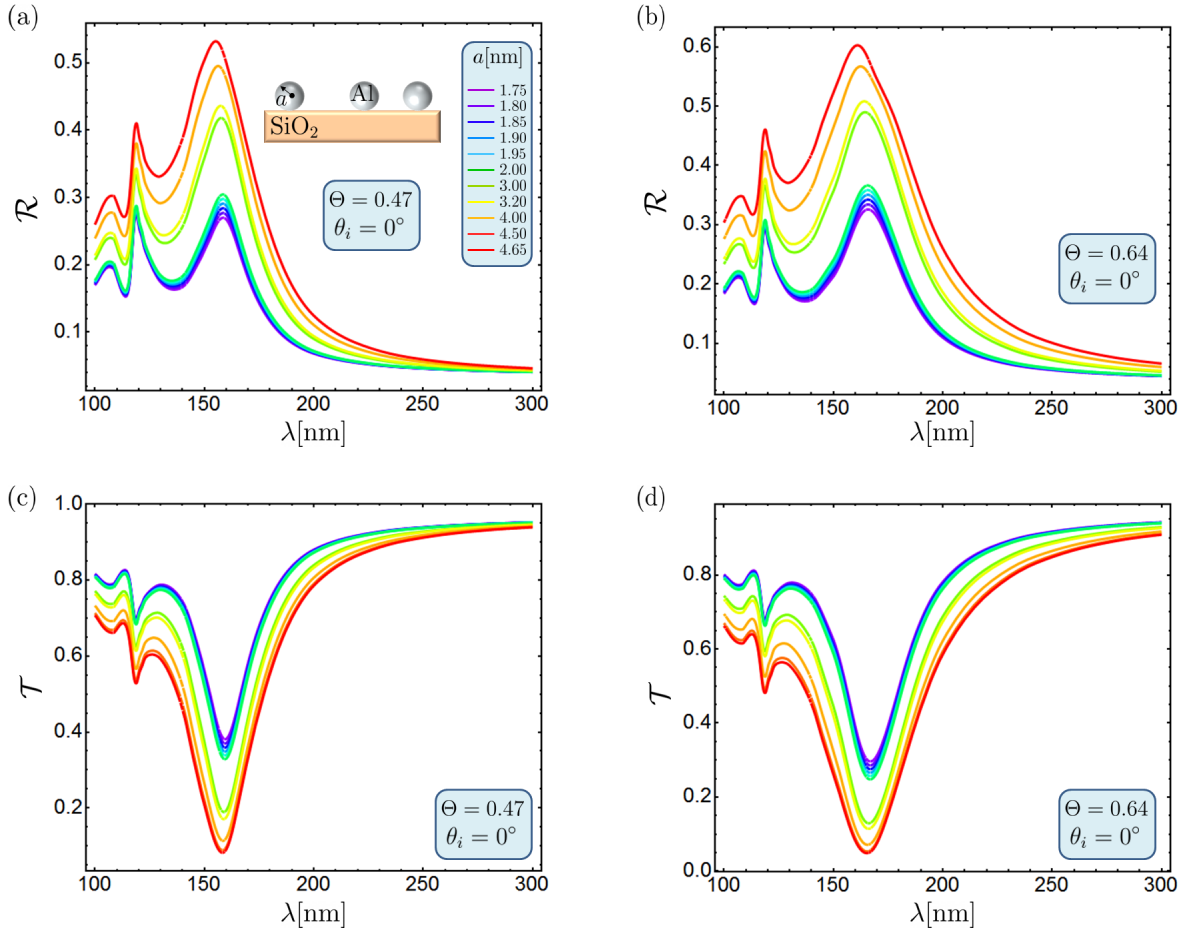


Fig. 3.7: Reflectancia y transmitancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio para valores de radio en el intervalo Δa , en función de la longitud de onda. Las gráficas superiores [(a) – (b)] muestran los resultados de \mathcal{R}_1 con $\Theta = 0.47$ y \mathcal{R}_2 con $\Theta = 0.64$. Las gráficas inferiores [(c) – (d)] muestran los resultados de \mathcal{T}_1 con $\Theta = 0.47$ y \mathcal{T}_2 con $\Theta = 0.64$.

3. RESULTADOS

Los valores de fracción de cubierta se calcularon con la expresión $\Theta = \pi a^2 / (2a + \langle D_{min} \rangle)^2$ a partir de un valor de separación promedio entre partículas $\langle D_{min} \rangle = 1$ nm [29], y los radios de partícula $a = 1.75$ nm y $a = 4.65$ nm, que corresponden a los valores extremos del intervalo Δa . Los espectros de \mathcal{R} muestran dos máximos localizados alrededor de $\lambda_0 = 156$ nm y $\lambda_1 = 107$ nm. Las longitudes de onda asociadas al máximo λ_0 de \mathcal{R} para una fracción de cubierta $\Theta = 0.47$ están contenidas en el intervalo $\Delta_1^{\mathcal{R}}\lambda_0 = (155 - 158)$ nm¹⁹ y el máximo tiene un corrimiento $\delta_1^{\mathcal{R}}\lambda_0 = 3.3$ nm. Para $\Theta = 0.64$, $\Delta_2^{\mathcal{R}}\lambda_0 = (161 - 165.8)$ nm y $\delta_2^{\mathcal{R}}\lambda_0 = 4.8$ nm. Para ambos valores de fracción de cubierta, el máximo λ_0 de \mathcal{R} se corre a longitudes de onda menores conforme el tamaño de la nanopartícula aumenta y el máximo λ_1 de \mathcal{R} se corre a longitudes de onda mayores conforme el tamaño de la nanopartícula aumenta, y están contenidas en el intervalo $\Delta_1^{\mathcal{R}}\lambda_1 = (106 - 107)$ nm para $\Theta = 0.47$ y $\Delta_2^{\mathcal{R}}\lambda_1 = (106 - 107)$ nm para $\Theta = 0.64$. Por otra parte, los espectros de \mathcal{T} muestran dos mínimos localizados alrededor de $\lambda_0 = 158.8$ nm y $\lambda_1 = 107$ nm. Las longitudes de onda asociadas al mínimo λ_0 de \mathcal{T} para una fracción de cubierta de $\Theta = 0.47$ están contenidas en el intervalo $\Delta_1^{\mathcal{T}}\lambda_0 = (158 - 159)$ nm y el mínimo tiene un corrimiento $\delta_1^{\mathcal{T}}\lambda_0 = 1.2$ nm¹⁹. Para $\Theta = 0.64$, $\Delta_2^{\mathcal{T}}\lambda_0 = (165 - 166)$ nm y $\delta_2^{\mathcal{T}}\lambda_0 = 1.6$ nm. En ambos casos el mínimo λ_0 de \mathcal{T} se corre a longitudes de onda menores conforme el tamaño de la nanopartícula aumenta y el mínimo λ_1 de \mathcal{T} se corre a longitudes de onda mayores conforme el tamaño de la partícula aumenta, y están contenidas en el intervalo $\Delta_1^{\mathcal{T}}\lambda_1 = (106 - 108)$ nm para $\Theta = 0.47$ y $\Delta_2^{\mathcal{T}}\lambda_1 = (106 - 108)$ nm para $\Theta = 0.64$. El incremento en el radio de la nanopartícula ensancha los espectros de \mathcal{R} y \mathcal{T} , y también corre a longitudes de onda menores tanto el máximo de \mathcal{R} como el mínimo de \mathcal{T} . Para $\Theta = 0.64$, la cantidad de luz que se refleja es mayor respecto a los valores obtenidos para $\Theta = 0.47$; para un radio fijo con $\Theta = 0.64$ la cantidad de luz que se transmite es menor comparada a los valores obtenidos con $\Theta = 0.47$.

Aunque los datos experimentales de absorbancia reportados en la publicación [29] se realizan a incidencia normal, es interesante conocer el efecto de la variación del ángulo de incidencia en el espectro asociado al sistema monocapa desordenado de nanopartículas de aluminio descrito en la Sec. 2, por lo que a continuación se calcula tanto la reflectividad como la transmitancia de un sistema monocapa desordenada, embebida en aire y soportada sobre un sustrato de SiO₂, con un radio de partícula $a = 3.2$ nm, iluminado en configuración de incidencia externa, en función del ángulo de incidencia en el intervalo $\Delta\theta_i = (0^\circ - 70^\circ)$ y la longitud de onda en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm. La Fig. 3.8 muestra a \mathcal{R} en polarización p , ver Figs. 3.8(a) y (c), y en polarización s , ver Figs. 3.8(b) y (d), para los valores $\Theta = 0.47$, ver Figs. 3.8(a) y (b), y $\Theta = 0.64$, ver Figs. 3.8(c) y (d). De la Fig. 3.8(a) se observan dos máximos en polarización p de \mathcal{R}_1^{p20} localizados alrededor de ${}^p\lambda_0^{\mathcal{R}} = 157$ nm y ${}^p\lambda_1^{\mathcal{R}} = 107$ nm. Conforme el ángulo de incidencia aumenta en el intervalo $\Delta\theta$, el máximo ${}^p\lambda_0^{\mathcal{R}}$ de \mathcal{R}_1^p se corre a longitudes de onda menores en el intervalo $\Delta_1^{\mathcal{R}}\lambda_0 = (157 - 152)$ nm y la intensidad de \mathcal{R}_1^p decrece. Para valores de \mathcal{R}_1^p en el intervalo $\Delta\theta = (10^\circ - 70^\circ)$ se muestra una reflectividad con valores cercanos a cero para longitudes de onda menores al segundo máximo de reflexión en ${}^p\lambda_1^{\mathcal{R}} = 107$ nm. Para valores mayores a $\lambda = 180$ nm, \mathcal{R}_1^p tiene valores cercanos a cero para cualquier valor de θ_i . Para \mathcal{R}_2^p , ver Fig. 3.8(c), se observa la presencia de dos máximos localizados alrededor de ${}^p\lambda_0^{\mathcal{R}} = 164$ nm y ${}^p\lambda_1^{\mathcal{R}} = 161$ nm. El máximo de reflexión ${}^p\lambda_0^{\mathcal{R}}$ se corre a una longitud de onda mayor ${}^p\lambda_0^{\mathcal{R}} = 164$ nm, con respecto al máximo de \mathcal{R}_1^p . Conforme el ángulo de incidencia aumenta, la longitud de onda ${}^p\lambda_0^{\mathcal{R}}$ se recorre a longitudes

¹⁹Los superíndices en \mathcal{R} y \mathcal{T} hacen referencia a la reflectividad y transmitancia calculadas para las diferentes polarizaciones de la luz incidente. El subíndice 1 hace referencia a los datos obtenidos con $\Theta = 0.47$ y el subíndice 2 para $\Theta = 0.64$.

²⁰El superíndice p, s hace referencia a las polarizaciones p y s , respectivamente.

3.3 Reflectancia y transmitancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio

de onda mayores en el intervalo $\Delta_2^{\mathcal{R}}\lambda_0 = (164 - 161)$ nm y la intensidad de \mathcal{R}_2 decrece. La región donde \mathcal{R}_2^p tiene un valor cercano a cero es menor que la región de \mathcal{R}_1^p y ocurre para valores en el intervalo $\Delta\theta = (10^\circ - 60^\circ)$ y longitudes de onda menores al segundo máximo de reflexión en $\lambda_1^{\mathcal{R}} = 107$ nm. Para valores mayores a $\lambda = 210$ nm, \mathcal{R}_2^p tiene valores cercanos a cero para cualquier valor de θ_i . En polarización *s*, y para $\Theta = 0.47$, ver Fig. 3.8(b), se observa la presencia de dos máximos alrededor ${}^s\lambda_0^{\mathcal{R}} = 159$ nm y ${}^s\lambda_1^{\mathcal{R}} = 117$ nm. Conforme el ángulo de incidencia aumenta, tanto el máximo localizado en ${}^s\lambda_0^{\mathcal{R}} = 159$ nm como el máximo en ${}^s\lambda_1^{\mathcal{R}} = 117$ nm permanecen constantes y la intensidad de \mathcal{R}_1^s aumenta. De igual forma en \mathcal{R}_2^s , ver Fig. 3.8(d), los máximos localizados en ${}^s\lambda_0^{\mathcal{R}} = 164$ nm, y ${}^s\lambda_1^{\mathcal{R}} = 107$ nm, también permanecen constantes conforme el ángulo de incidencia aumenta y la intensidad de \mathcal{R}_2^s aumenta, para todo valor dentro de $\Delta\theta = (0^\circ - 70^\circ)$. En ambas polarizaciones, el efecto de aumentar la fracción de cubierta ensancha los espectros de reflectancia.

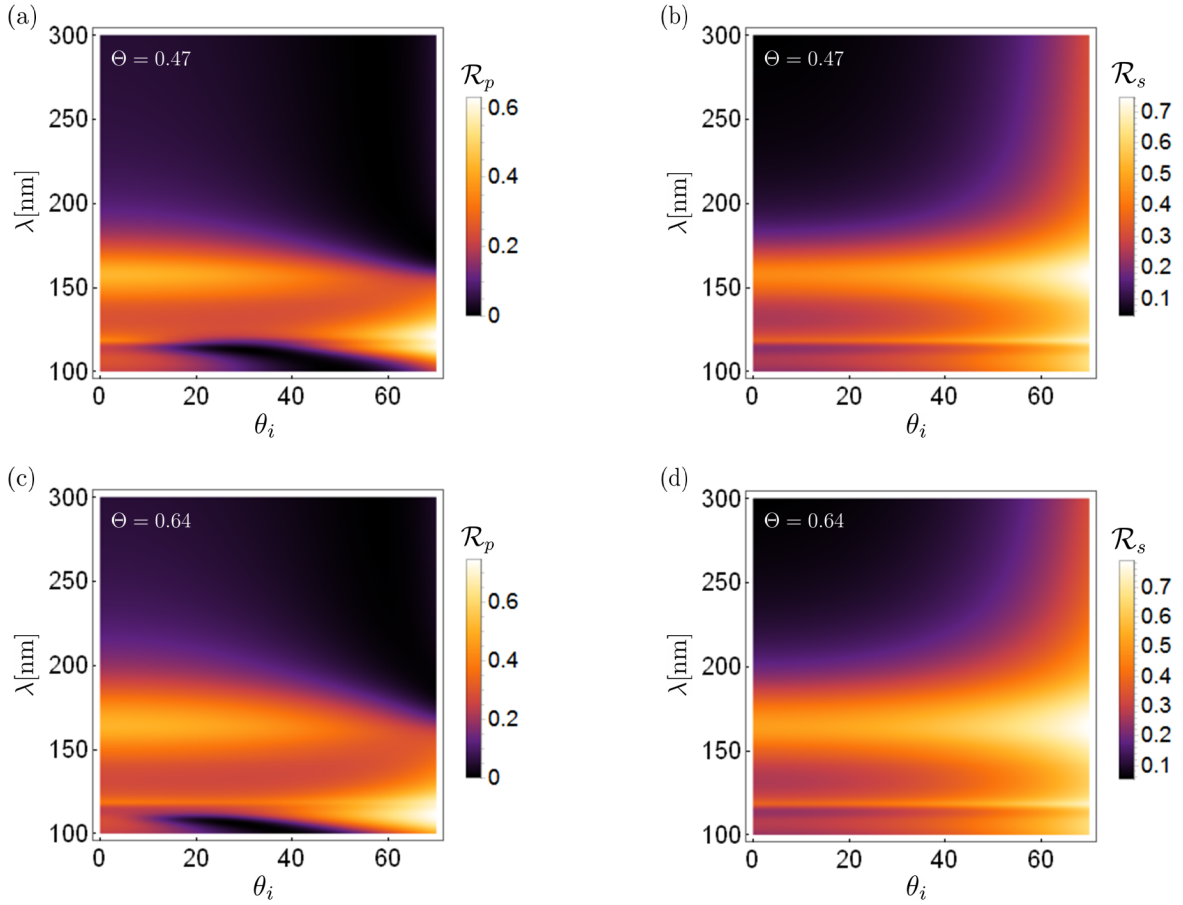


Fig. 3.8: Reflectancia para una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio con radio $a = 3.2$ nm, en función de la longitud de onda en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm y el ángulo de incidencia θ_i . Las gráficas superiores [(a) – (b)] muestran los resultados de \mathcal{R}_1^p y \mathcal{R}_1^s con $\Theta = 0.47$ y las gráficas inferiores [(c) – (d)] muestran los resultados de \mathcal{R}_2^p y \mathcal{R}_2^s con $\Theta = 0.64$.

Por otra parte, la Fig. 3.9 muestra la transmitancia \mathcal{T} en polarización *p*, ver Figs. 3.9(a) y (c), así como la transmitancia \mathcal{T} en polarización *s*, ver Figs. 3.9(b) y (d), con $a = 3.2$ nm, para los valores de $\Theta = 0.47$, ver Figs. 3.9(a) y (b) y $\Theta = 0.64$, ver Figs. 3.9(c) y (d). De la Fig. 3.9(a) se observan

3. RESULTADOS

dos mínimos localizados en ${}^p\lambda_0^{\mathcal{T}} = 158$ nm y ${}^p\lambda_1^{\mathcal{T}} = 107$ nm. Conforme el ángulo de incidencia aumenta, el mínimo ${}^p\lambda_0^{\mathcal{T}} = 158$ nm de \mathcal{T}_1^p se mantiene constante, su intensidad aumenta y el ancho espectral de \mathcal{T}_1^p se angosta. El segundo mínimo localizado en ${}^p\lambda_1^{\mathcal{T}} = 107$ nm también se mantiene constante, su intensidad disminuye y el ancho espectral \mathcal{T}_1^p se ensancha. Para \mathcal{T}_2^p , ver Fig. 3.9(c), se observan dos mínimos de transmisión en ${}^p\lambda_0^{\mathcal{T}} = 166$ nm y ${}^p\lambda_1^{\mathcal{T}} = 110$ nm. Ambos mínimos se mantienen constantes para todo ángulo de incidencia, alrededor del valor ${}^p\lambda_0^{\mathcal{T}} = 166$ nm la intensidad del máximo aumenta y el espectro de \mathcal{T}_2^p se angosta conforme θ_i aumenta, mientras que alrededor del valor ${}^p\lambda_1^{\mathcal{T}} = 110$ nm, la intensidad del mínimo disminuye y el espectro de \mathcal{T}_2^p se ensancha. En polarización s con $\Theta = 0.47$, ver Fig. 3.9(b), se observa que el espectro de \mathcal{T}_1^s tienen dos mínimos de transmisión en ${}^p\lambda_0^{\mathcal{T}} = 158$ nm y ${}^s\lambda_1^{\mathcal{T}} = 118$ nm. Ambos mínimos permanecen constantes para todo valor de θ_i y su intensidad decrece conforme el ángulo de incidencia aumenta. Para $\Theta = 0.64$, ver Fig. 3.9(d), se observa que el espectro de \mathcal{T}_2^s tiene también dos mínimos de transmisión localizados en ${}^s\lambda_0^{\mathcal{T}} = 166$ nm y ${}^s\lambda_1^{\mathcal{T}} = 110$ nm, que permanecen constantes para todo valor de θ_i , y conforme el ángulo de incidencia aumenta su intensidad disminuye y el espectro de \mathcal{T}_2^s se ensancha. En ambas polarizaciones el efecto de aumentar la fracción de cubierta ensancha y corre los espectros de transmitancia a longitudes de onda mayores.

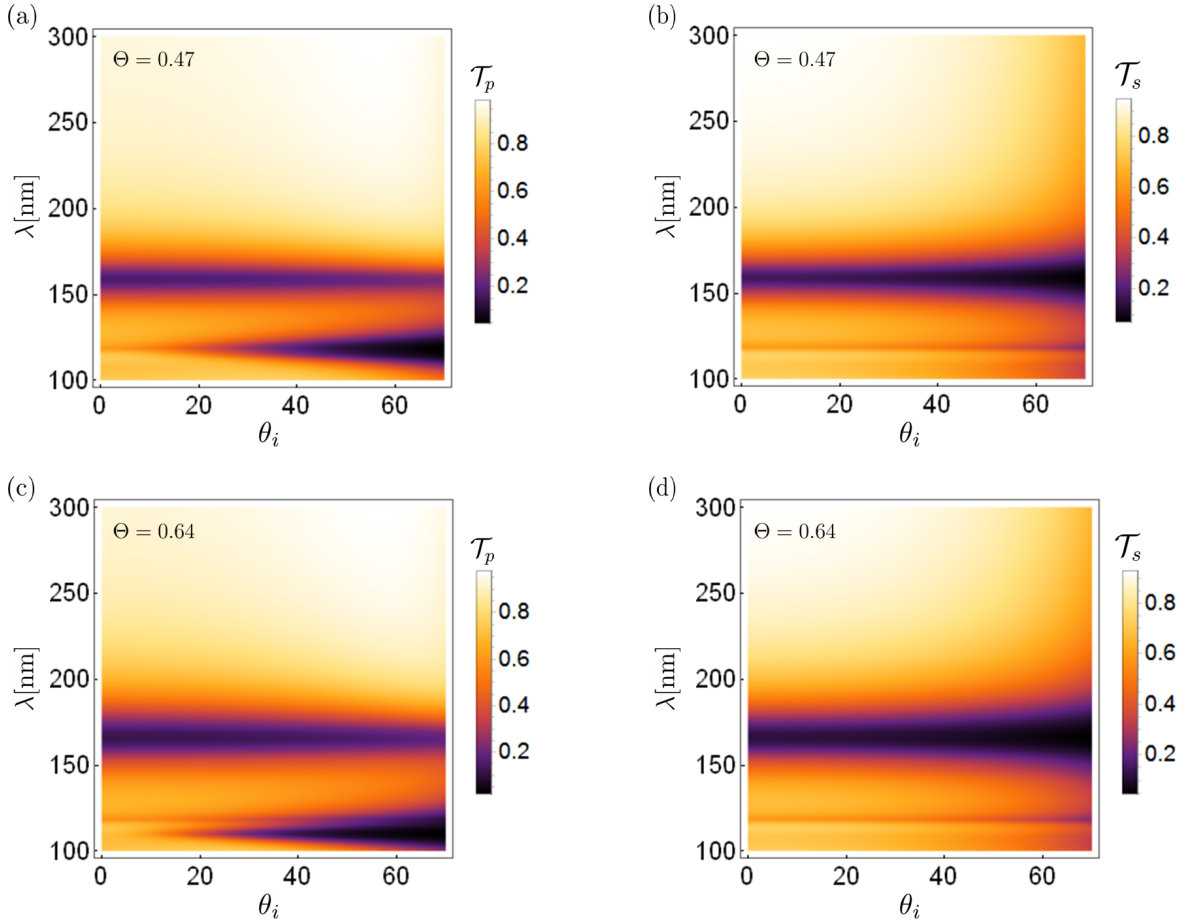


Fig. 3.9: Transmitancia para una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio con radio $a = 3.2$ nm, en función de la longitud de onda en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm y el ángulo de incidencia θ_i . Las gráficas superiores [(a) – (b)] muestran los resultados de \mathcal{T}_1^p y \mathcal{T}_1^s con $\Theta = 0.64$ y las gráficas inferiores [(c) – (d)] muestran los resultados de \mathcal{T}_2^p y \mathcal{T}_2^s con $\Theta = 0.64$.

Con el análisis realizado se demuestra que en ambas polarizaciones el efecto de aumentar la fracción de cubierta ensancha los espectros de transmitancia y reflectancia y corre los mínimos de transmitancia así como los máximos de reflectancia a longitudes de onda mayores. En el caso de la reflectancia, la variación del ángulo de incidencia corre a longitudes de onda menores el máximo $\lambda_0^{\mathcal{R}}$, mientras que el máximo $\lambda_1^{\mathcal{R}}$ se corre a longitudes de onda mayores. Por otra parte, tanto el mínimo $\lambda_0^{\mathcal{T}}$ como $\lambda_1^{\mathcal{T}}$ de los espectros de transmitancia, permanecen constantes conforme el ángulo de incidencia aumenta. A partir de los datos obtenidos para la reflectancia y transmitancia es posible calcular la absorción, ver Ec. (1.193), y la absorbancia, ver Ec. (1.194), para el sistema monocapa descrito en la Sec. 2.

3.4. Absorción y absorbancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio

Dado que el objetivo de este trabajo es el de comparar la absorbancia del sistema monocapa descrito en la Sec. 2, iluminado a incidencia normal, con la absorbancia del sistema multicapa descrito en la Sec. 1.2.1, a continuación se calcula la absorción y absorbancia de una monocapa de nanopartículas de aluminio desordenadas, embebidas en aire, soportadas en un sustrato de SiO_2 , al ser iluminada en configuración externa. La absorción (ver Sec. 1.5) del sistema multicapa está definida por la Ec. (1.193)

$$\mathcal{R} + \mathcal{T} + \mathcal{A} = 1,$$

donde \mathcal{R} y \mathcal{T} se calcularon en la Sec. 3.3. Es decir, la cantidad de luz que no es reflejada ni transmitida por el sistema multicapa, es absorbida.

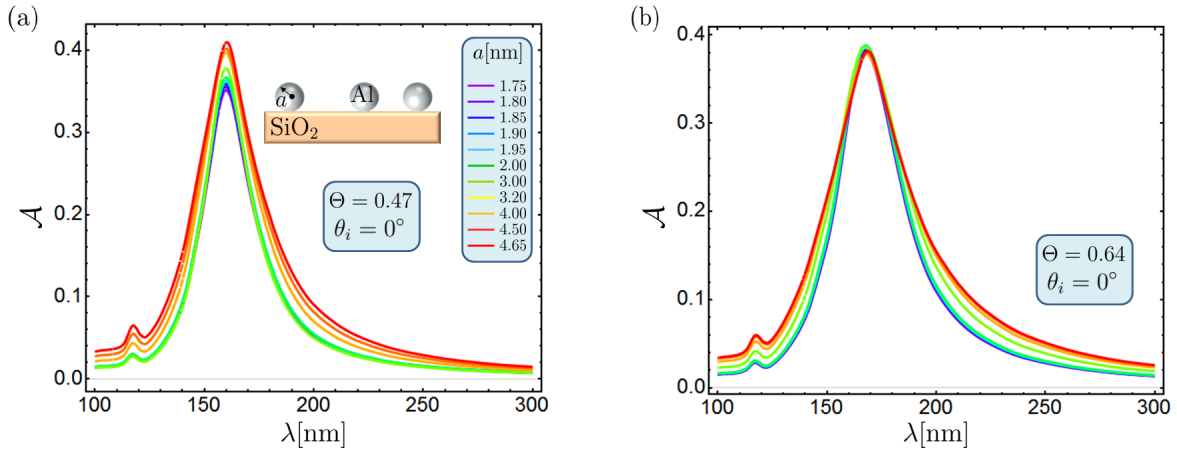


Fig. 3.10: Absorción de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio con valores de radio en el intervalo Δa en función de la longitud de onda. Las gráficas muestran los resultados de (a) \mathcal{A}_1 con $\Theta = 0.47$ y (b) \mathcal{A}_2 con $\Theta = 0.64$.

Dado que la monocapa tiene una distribución de tamaños en el intervalo Δa , se realizaron los cálculos de \mathcal{A} del sistema monocapa, iluminada a incidencia normal, en el intervalo $\Delta\lambda = (100-300)$ nm, para valores de partícula en dicho intervalo Δa , considerando dos fracciones de cubierta

3. RESULTADOS

$\Theta = 0.47$, ver Fig. 3.10(a), y $\Theta = 0.64$, ver Fig. 3.10(b). Los espectros de absorción para una fracción de cubierta $\Theta = 0.47$ en función de la longitud de onda muestran dos máximos localizados alrededor de $\lambda_0^A = 159$ nm y $\lambda_1^A = 117$ nm. Las longitudes de onda asociadas al máximo λ_0^A de \mathcal{A}_1 para una fracción de cubierta $\Theta = 0.47$ están contenidas en el intervalo $\Delta_1^A \lambda_0 = (159 - 160)$ nm. Conforme el radio de la partícula aumenta en el intervalo Δa , el máximo se recorre al rojo por $\delta_1^A \lambda_0 = 0.3$ nm. El segundo máximo λ_1^A de \mathcal{A}_1 permanece constante en el valor $\lambda_1^A = 117$ nm dentro del intervalo de radios Δa . En el espectro de absorción en función del radio de la partícula, la longitud de onda para la cual se tiene una mayor absorción está localizada en $\lambda = 160$ nm y corresponde al valor $a = 4.65$ nm. Para $\Theta = 0.64$, se observan dos picos de absorción localizados alrededor de $\lambda_0^A = 167$ nm y $\lambda_1^A = 117$ nm. Las longitudes de onda asociadas al máximo λ_0^A están contenidas en el intervalo $\Delta_2^A \lambda_0 = (167 - 168)$ nm y conforme el radio de la partícula aumenta en el intervalo Δa el máximo se recorre al rojo por $\delta_2^A \lambda_0 = 1.02$ nm. El máximo λ_2^A de \mathcal{A}_2 permanece constante en el valor $\lambda_1^A = 117$ nm dentro del intervalo de radios Δa . En el espectro de absorción en función del radio de partícula, la longitud de onda para la cual se tiene una mayor absorción es $\lambda = 160$ nm y corresponde al valor $a = 2$ nm.

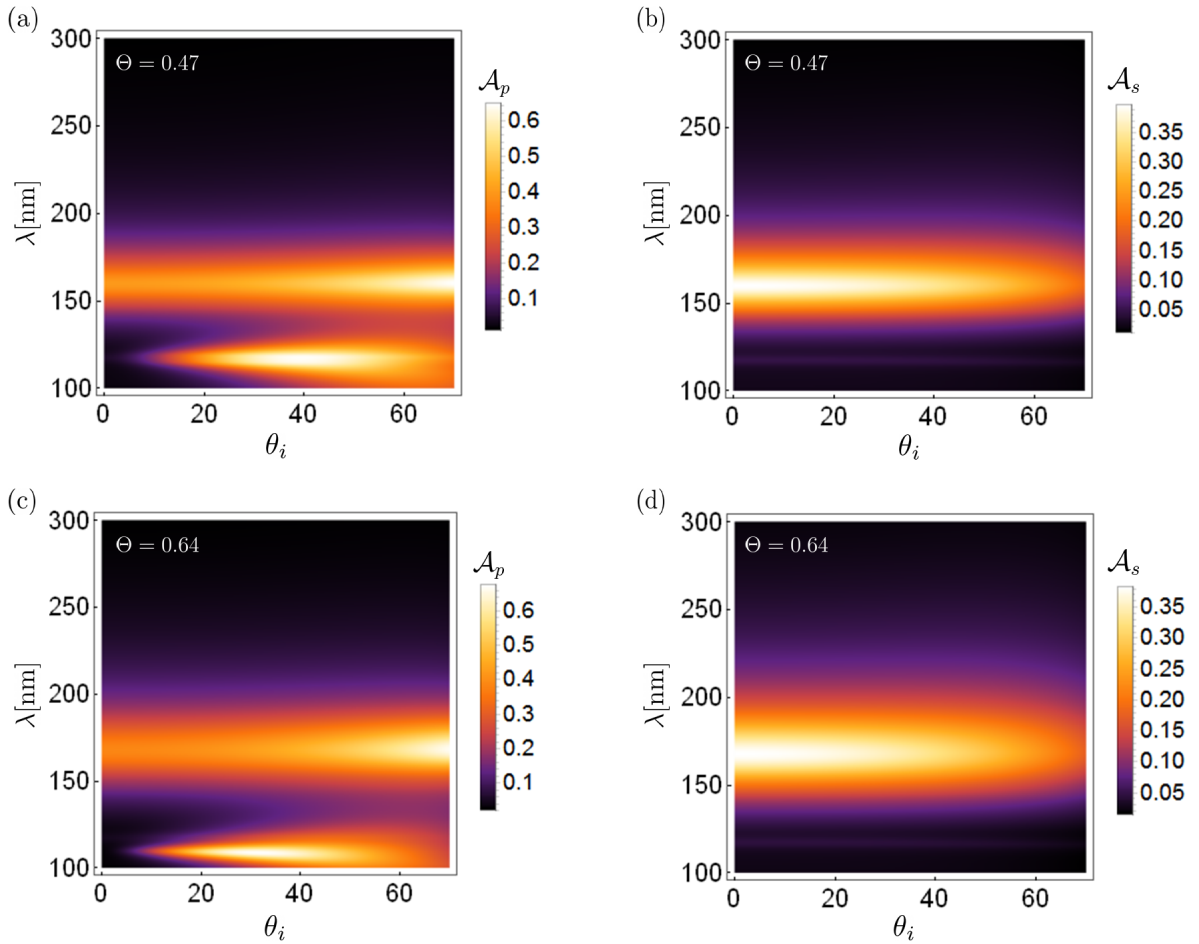


Fig. 3.11: Absorción para una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio con radio $a = 3.2$ nm, en función de la longitud de onda en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm y el ángulo de incidencia θ_i . Las gráficas superiores [(a) – (b)] muestran los resultados de \mathcal{A}_1^p y \mathcal{A}_1^s con $\Theta = 0.47$ y las gráficas inferiores [(c) – (d)] muestran los resultados de \mathcal{A}_2^p y \mathcal{A}_2^s con $\Theta = 0.64$.

Para tener una idea más general de cómo se comporta la absorción en función del ángulo de incidencia, en la Fig. 3.11 se muestra \mathcal{A} para ambas polarizaciones (Figs. 3.11(a) y (c) para polarización p y Figs. 3.11(b) y (d) para polarización s) y para los dos valores de fracción de cubierta considerados (Figs. 3.11(a) y (b) para $\Theta = 0.47$ y Figs. 3.11(c) y (d) para $\Theta = 0.64$), considerando un radio para las nanopartículas de aluminio de 3.2 nm. En ambas polarizaciones con $\Theta = 0.47$, se observan dos máximos localizados alrededor de ${}^{s,p}\lambda_0^A = 159$ nm y ${}^{s,p}\lambda_1^A = 117$ nm. En polarización p , ver Fig. 3.11(a), la intensidad del máximo asociado a ${}^p\lambda_0^A$ aumenta mientras que el máximo asociado a ${}^p\lambda_1^A$ decrece conforme el ángulo de incidencia aumenta en el intervalo $\Delta\theta$. El espectro de \mathcal{A}_1^p alrededor del máximo ${}^p\lambda_0^A = 159$ nm se ensancha conforme θ_i aumenta, y alrededor del máximo ${}^p\lambda_1^A = 117$ nm el espectro de \mathcal{A}_1^p también se ensanchan. En polarización s , ver Fig. 3.11(b), la intensidad del máximo asociado a ${}^s\lambda_0^A = 159$ nm decrece conforme el ángulo de incidencia aumenta, y el ancho espectral de \mathcal{A}_1^s se mantiene constante para valores $\theta_i < 50^\circ$, y para valores $\theta_i > 50^\circ$ el espectro de \mathcal{A}_1^s se angosta. Tanto el ancho espectral como la intensidad del máximo alrededor de ${}^s\lambda_1^A = 117$ nm se mantienen constante conforme el ángulo de incidencia aumenta. Por otra parte, para el valor $\Theta = 0.64$ en polarización p , ver Fig. 3.11(c), se observa la presencia de dos máximos en el espectro de absorción, localizados en ${}^p\lambda_0^A = 167$ nm y ${}^p\lambda_1^A = 110$ nm. Conforme el ángulo de incidencia aumenta, el ancho espectral alrededor del máximo ${}^p\lambda_1^A = 110$ nm aumenta. Conforme el ángulo de incidencia aumenta, la intensidad del máximo alrededor de ${}^p\lambda_0^A$ aumenta, mientras que la intensidad del máximo alrededor del valor ${}^p\lambda_1^A$ disminuye. En polarización s , ver Fig. 3.11(d), se observan dos máximos localizados alrededor de ${}^s\lambda_0^A = 167$ nm y ${}^s\lambda_1^A = 117$ nm. Conforme el ángulo de incidencia aumenta, la intensidad del máximo alrededor de ${}^s\lambda_0^A = 167$ nm disminuye y su ancho espectral se mantiene constante para valores $\theta_i < 60^\circ$; para valores $\theta_i > 60^\circ$ el ancho espectral de absorción se angosta. Tanto la intensidad, como el ancho espectral alrededor del máximo ${}^s\lambda_1^A = 117$ nm se mantiene constante para todo valor dentro del intervalo $\Delta\theta$. En todos los espectros, el incremento en la fracción de cubierta ensancha los espectros de \mathcal{A} , y también recorre al rojo el máximo λ_0^A de \mathcal{A} . La variación del ángulo de incidencia no afecta la posición de los máximos de absorción, para valores de $\theta_i > 50^\circ$ en polarización p ensancha los espectros de \mathcal{A}_p , mientras que en polarización s angosta los espectros de \mathcal{A}_s .

El propósito principal de esta tesis es el cálculo de la absorbancia del sistema monocapa descrito en la Sec. 2, dada por la Ec. (1.194)

$$\mathcal{A}' = -\log_{10}(\mathcal{T}),$$

por lo que la absorbancia es una medida logarítmica de la transmitancia. Experimentalmente es más sencillo medir la absorbancia \mathcal{A}' en comparación con la absorción \mathcal{A} del sistema monocapa desordenada, ya que sólo es necesario medir la luz transmitida por el sistema para obtener información de la absorbancia.

Dado que la monocapa tiene una distribución de tamaños en el intervalo Δa , se muestran resultados de \mathcal{A}' del sistema multicapa, iluminada a incidencia normal en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm, para valores de partícula en el intervalo Δa , considerando tres fracciones de cubierta $\Theta = 0.47$, ver Fig. 3.12(a), y $\Theta = 0.64$, ver Fig. 3.12(b), y $\Theta = 0.58$, ver Fig. 3.12(c). La fracción de cubierta $\Theta = 0.58$ es de interés debido a que corresponde al valor calculado con la expresión $\Theta = \pi a^2 / (2a + \langle D_{min} \rangle)^2$ a partir de un valor de separación promedio entre partículas $\langle D_{min} \rangle = 1$ nm [29], y un radio promedio de partícula $a = 3.2$ nm, que coincide con el máximo de la distribución de tamaños (ver Fig. 2.2) de la monocapa de interés descrita en la Sec. 2, mientras

3. RESULTADOS

que los valores $\Theta = 0.47$ y $\Theta = 0.64$ se calcularon utilizando los valores extremos de la distribución de radios Δa de la monocapa de interés con valores de radio promedio de partícula $a = 1.75$ nm y $a = 4.65$ nm, respectivamente.

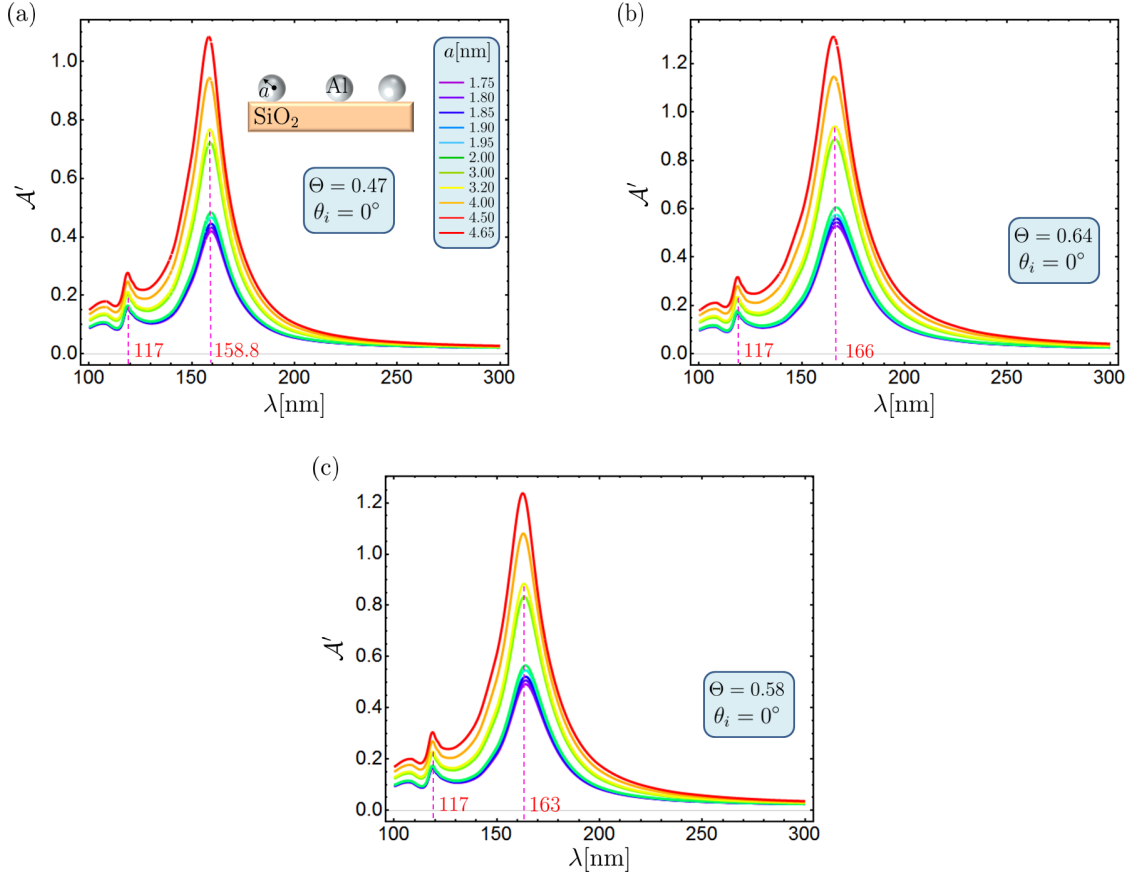


Fig. 3.12: Absorbancia para una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio con radio en el intervalo Δa en función de la longitud de onda en el intervalo $\Delta \lambda = (100 - 300)$ nm. Las gráficas muestran los resultados de (a) \mathcal{A}'_1 con $\Theta = 0.47$, (b) \mathcal{A}'_2 con $\Theta = 0.64$ y (c) \mathcal{A}'_3 ²¹ con $\Theta = 0.58$.

La Fig. 3.12(a) muestra el espectro de \mathcal{A}' para una fracción de cubierta $\Theta = 0.47$, donde se observan dos máximos localizados alrededor de $\lambda_0 = 158.8$ nm y $\lambda_1 = 117$ nm. Las longitudes de onda asociadas al máximo λ_0 de \mathcal{A}'_1 están contenidas en el intervalo $\Delta_1^{A'} \lambda_0 = (158 - 159)$ nm y tiene un corrimiento al rojo $\delta_1^{A'} \lambda_0 = 1.2$ nm, dentro del intervalo de radios $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ nm. Para $\Theta = 0.64$, ver Fig. 3.12(b), se observa que los máximos están localizados alrededor de $\lambda_0 = 166$ nm y $\lambda_1 = 117$ nm. Las longitudes de onda asociadas al máximo λ_0 de \mathcal{A}'_2 están contenidas en el intervalo $\Delta_2^{A'} \lambda_0 = (165 - 166)$ nm y tiene un corrimiento al rojo $\delta_2^{A'} \lambda_0 = 1.61$ nm, dentro del intervalo de radios Δa . Para $\Theta = 0.58$, ver Fig. 3.12(c), se observa la presencia de dos máximos localizados alrededor de $\lambda_0 = 163$ nm y $\lambda_1 = 117$ nm. Las longitudes de onda asociadas al máximo λ_0 de \mathcal{A}'_3 ²¹ están contenidas en el intervalo $\Delta_3^{A'} \lambda_0 = (162 - 164)$ nm y tiene un corrimiento al rojo $\delta_3^{A'} \lambda_0 = 1.44$ nm. Para las tres fracciones de cubierta $\Theta = 0.47, 0.64$ y

²¹El subíndice 3 hace referencia a los datos obtenidos con $\Theta = 0.58$.

0.58, las longitudes de onda asociadas al segundo máximo de \mathcal{A}' , están contenidas en el intervalo $\Delta^{A'} \lambda_0 = (116 - 118)$ nm y tiene un corrimiento al rojo $\delta^{A'} \lambda_0 = 1.22$ nm. El incremento en el radio de la partícula así como el incremento en la fracción de cubierta produce un ensanchamiento en los espectros de \mathcal{A}' también corre a longitudes de onda mayores el máximo de \mathcal{A}' . Las longitudes de onda λ_0 asociadas al radio $a = 3.2$ nm, son: $\lambda = 158.8$ nm, para $\Theta = 0.47$, $\lambda = 166$ nm, para $\Theta = 0.64$ y $\lambda = 163$ nm, para $\Theta = 0.58$.

Por otra parte, en la Fig. 3.13 se muestra \mathcal{A}' para ambas polarizaciones (Figs. 3.13(a) y (c) para polarización p y Figs. 3.13(b) y (d) para polarización s) y para dos valores de fracción de cubierta (Figs. 3.13(a) y (b) para $\Theta = 0.47$ y Figs. 3.13(c) y (d) para $\Theta = 0.64$), considerando un radio para las nanopartículas de aluminio de 3.2 nm.

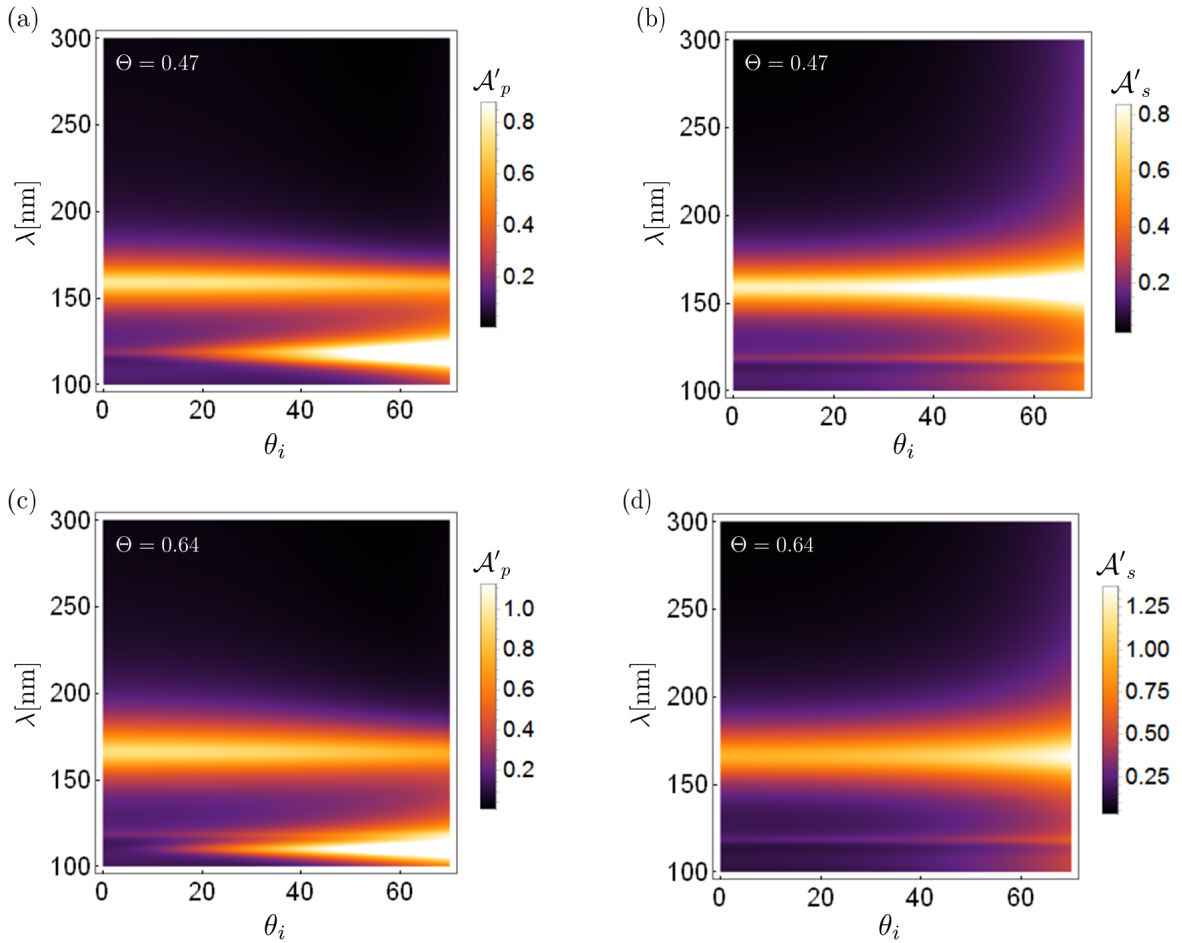


Fig. 3.13: Absorbancia para una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio con radios $a = 3.2$ nm, en función de la longitud de onda en el intervalo $\Delta\lambda$ y el ángulo de incidencia en el intervalo $\Delta\Theta = (0^\circ - 70^\circ)$. Las gráficas superiores [(a) – (b)] muestran los resultados de \mathcal{A}'_1^p y \mathcal{A}'_1^s con $\Theta = 0.47$. Las gráficas inferiores [(c) – (d)] muestran los resultados de \mathcal{A}'_2^p y \mathcal{A}'_2^s con $\Theta = 0.64$.

En ambas polarizaciones con $\Theta = 0.47$, ver Fig. 3.13(a) y (b), se observan dos máximos localizados alrededor de ${}^{s,p}\lambda_0^A = 159$ nm y ${}^{s,p}\lambda_1^A = 117$ nm. En polarización p , ver Fig. 3.13(a), conforme el ángulo de incidencia aumenta, tanto el máximo ${}^p\lambda_0^A = 159$ nm de \mathcal{A}'_1^p como el ancho espectral de \mathcal{A}'_1^p se mantienen constantes y su intensidad aumenta, para el segundo máximo ${}^p\lambda_1^A = 117$ nm,

3. RESULTADOS

conforme el ángulo de incidencia aumenta, se mantiene constante, su intensidad aumenta y el espectro de \mathcal{A}_1^p se ensancha. En polarización p , ver Fig. 3.13(b), conforme el ángulo de incidencia aumenta, el máximo ${}^s\lambda_0^A = 159$ nm de \mathcal{A}_1^s se mantiene constante, su intensidad aumenta y el ancho espectral de $\mathcal{A}_1^{s,p}$ se ensancha, para el segundo máximo ${}^s\lambda_1^A = 117$ nm, tanto el máximo como el ancho espectral de \mathcal{A}_1^s se mantienen constantes, y su intensidad aumenta. Para $\Theta = 0.64$ y en ambas polarizaciones se observan dos máximos localizados alrededor de ${}^{s,p}\lambda_0^A = 167$ nm y ${}^{s,p}\lambda_1^A = 117$ nm. En ambas polarizaciones, ver Fig. 3.13(c) y (d), conforme el ángulo de incidencia aumenta, el máximo se mantiene constante y tanto la intensidad como el ancho espectral de $\mathcal{A}_2^{s,p}$ aumentan. En polarización p , ver Fig. 3.13(c), conforme el ángulo de incidencia aumenta el máximo ${}^p\lambda_1^A = 117$ nm se mantiene constante y tanto su intensidad como el ancho espectral aumentan, mientras que en polarización s , ver Fig. 3.13(d), conforme el ángulo de incidencia aumenta el máximo ${}^s\lambda_1^A = 117$ nm se mantiene constante, su intensidad aumenta y el ancho espectral se mantiene constante.

El análisis previo nos permite conocer cómo es que cambian las propiedades en los espectros de absorbancia del sistema monocapa de interés cuando se tiene una distribución de tamaños en el intervalo $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ nm, con una variación de la fracción de cubierta en el intervalo $\Delta\Theta = (0.47 - 0.64)$, así como una variación en el ángulo de incidencia dentro del intervalo $\Delta\theta_i = (0^\circ - 70^\circ)$.

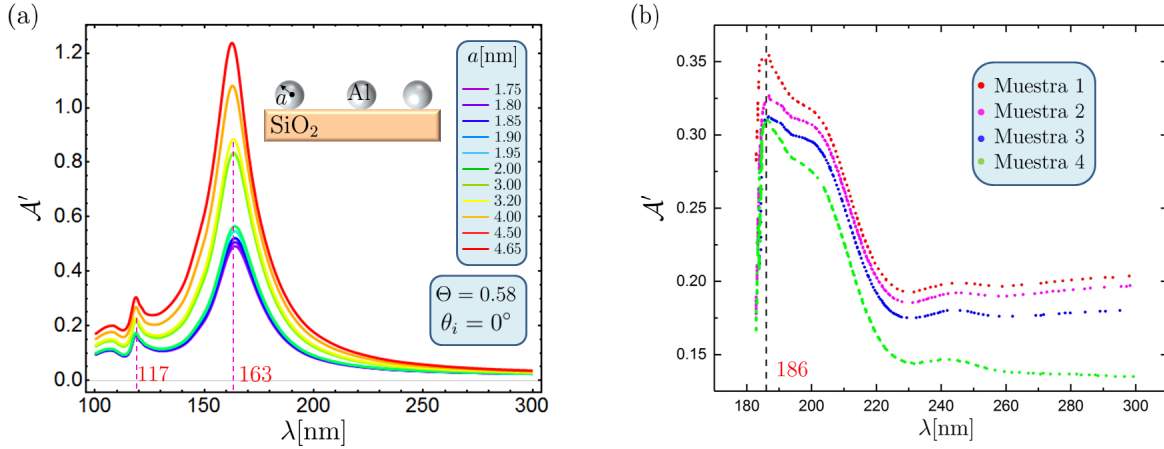


Fig. 3.14: Comparación de la absorbancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio con valores de radio en el intervalo Δa en función de la longitud de onda de los resultados (a) calculados a incidencia normal con $\Theta = 0.58$ y (b) los datos experimentales reportados en el artículo de Rodríguez-Gómez et al.

En la Fig. 3.14, se comparan los espectros de absorbancia calculados a incidencia normal y $\Theta = 0.58$, para una distribución de radios en el intervalo $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ los cuales coinciden con la distribución de tamaños del sistema monocapa de interés descrito en la Sec. 2, con los datos experimentales de absorbancia reportados en el artículo de Rodríguez-Gómez et al. [29], donde el máximo está localizado en $\lambda = 186$ nm, ver Fig. 3.14(b). Se observa que la posición del máximo de absorbancia obtenido con la fórmula de Landau-Lifshitz para un radio promedio $a = 3.2$ nm, está cerca del máximo de absorbancia obtenido experimentalmente por 23 nm. La diferencia en la posición de los máximos obtenidos se puede deber a que el modelo dipolar ya no es del todo válido para fracciones de cubierta tan altas [11], sin embargo se gana intuición

sobre cómo la fracción de cubierta y la distribución de tamaños afecta el corrimiento del máximo de absorción. Contrario a lo reportado en el artículo de Rodríguez-Gómez et al. [29], donde se argumenta que el máximo de absorbancia a incidencia normal se debe al modo plasmónico dipolar de las partículas individuales, el máximo calculado a incidencia normal está localizado alrededor de $\lambda_0 = 163$ nm, mientras que el modo plasmónico dipolar de las partículas individuales sobre un sustrato de cuarzo está localizado en el intervalo $\Delta_s \lambda_0 = (144.5 - 148.9)$ nm dentro de la distribución de radios Δa .

Conclusiones

El objetivo principal de esta tesis fue comparar los cálculos de la absorbancia obtenidos para una monocapa de nanopartículas de aluminio con radio promedio $a = 3.2$ nm, soportadas sobre cuarzo con una separación promedio entre partículas $\langle D_{min} \rangle = 1$ nm, e iluminados en configuración externa a incidencia normal, con los resultados experimentales de la absorbancia reportados por el Dr. Rodríguez-Gómez et al., obtenidos para una metasuperficie desordenada de nanopartículas de aluminio depositadas sobre un sustrato de cuarzo e iluminados en configuración externa a incidencia normal. En la publicación del Dr. Rodríguez-Gómez se argumenta que el máximo de absorbancia observado en $\lambda = 186$ nm se debe al modo plasmónico dipolar de las partículas individuales que conforman la monocapa.

Para saber si la resonancia corresponde al modo plasmónico dipolar se estudió el caso de una nanopartícula de aluminio aislada y posteriormente el caso de una nanopartícula de aluminio soportada en cuarzo. La monocapa tiene una distribución de radios en el intervalo $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ nm, donde la contribución dominante al espectro de absorción es la dipolar. Dentro del intervalo Δa , las resonancias plasmónicas dipolares del espectro de la sección transversal de absorción quedan contenidas en el intervalo $\Delta \lambda_0 = (138.89 - 140.92)$ nm. Conforme el radio de la nanopartícula aumenta en el intervalo Δa , el modo plasmónico dipolar se corre a longitudes de onda mayores (energías menores) una cantidad $\delta \lambda_0 = 2.03$ nm. Para la nanopartícula de aluminio soportada sobre cuarzo, se mostró que el máximo de la contribución multipolar queda contenido en el intervalo $\Delta_S \lambda_0 = (144.58 - 148.97)$ nm. Conforme el radio de la nanopartícula aumenta en el intervalo Δa , el modo plasmónico se corre a longitudes de onda mayores (energías menores) una cantidad $\delta_S \lambda_0 = 4.39$ nm. A partir de estos resultados se concluye que el máximo de absorbancia en $\lambda = 186$ nm, observado en las muestras fabricadas por el Dr. Rodríguez-Gómez, no se debe al modo plasmónico dipolar de las partículas individuales. A partir del análisis de estos resultados, se gana intuición sobre el efecto en el espectro de secciones transversales en presencia de un sustrato de cuarzo y variación del radio de la partícula.

Con el objetivo de entender el efecto de la variación en la fracción de cubierta en la monocapa de interés y debido a que la separación promedio entre partículas en las muestras reportadas en el artículo de Rodríguez-Gómez es de 1 nm, se calcularon las propiedades ópticas: secciones transversales de absorción, esparcimiento y extinción de un dímero de nanopartículas de aluminio en función de la distancia de separación en el intervalo $\Delta d = (0.5 - 13)$ nm. Para el caso de un dímero de nanopartículas de aluminio de radio $a = 3.2$ nm soportado sobre cuarzo, las resonancias quedan contenidas en el intervalo $\Delta \lambda_S^d = (192.19 - 241.06)$ nm, con un corrimiento $\delta_S^d \lambda_0^d = 48.87$ nm. Se observa que la contribución principal del espectro sección transversal de absorción del dímero se corre a longitudes de onda mayores (energías menores) conforme la distancia de

3. RESULTADOS

separación entre partículas disminuye. A partir de los resultados del dímero soportado en cuarzo, es posible argumentar que el máximo de absorbancia de la monocapa se corre a longitudes de onda mayores conforme la fracción de cubierta aumenta.

Para saber si el máximo de absorbancia observado en $\lambda = 186$ nm se debe a la respuesta colectiva de las nanopartículas en la monocapa, se calcularon los espectros de absorbancia de una monocapa desordenada de nanopartículas de aluminio en función de la longitud de onda en el intervalo $\Delta\lambda = (100 - 300)$ nm, iluminados a un ángulo $\theta_i = 0^\circ$. Se observó que en el intervalo de radios $\Delta a = (1.75 - 4.65)$ nm, la contribución principal al espectro de absorbancia queda contenida en el intervalo $\Delta_1^{A'}\lambda_0 = (158.2 - 159.4)$ nm, con un corrimiento al rojo $\delta_1^{A'}\lambda_0 = 1.2$ nm, para $\Theta = 0.46$. Para $\Theta = 0.58$ la contribución principal al espectro de absorbancia queda contenida en el intervalo $\Delta_3^{A'}\lambda_0 = (162.6 - 164)$ nm, con un corrimiento al rojo $\delta_1^{A'}\lambda_0 = 1.4$ nm, mientras que para $\Theta = 0.64$ están contenidas en el intervalo $\Delta_2^{A'}\lambda_0 = (165.3 - 166.9)$ nm, el máximo tiene un corrimiento al rojo $\delta_2^{A'}\lambda_0 = 1.6$ nm. El efecto de incrementar la fracción de cubierta ensancha los espectros de absorbancia y provoca un corrimiento en el espectro de absorbancia a longitudes de onda mayores, así como incrementa la longitud del intervalo donde quedan contenidas las resonancias. Por otra parte, el efecto de la variación del ángulo de incidencia en los espectros de absorbancia no influye en la posición del máximo de la contribución principal, sin embargo cuando el ángulo de incidencia incrementa, aumenta la intensidad del máximo y ensancha los espectros de absorbancia.

A partir de los resultados obtenidos con el modelo dipolar y la formula de Landau-Lifshitz, se tiene que el máximo de absorbancia está localizado en $\lambda_0 = 163$ nm, el cual difiere por 23 nm con el máximo de absorbancia obtenido experimentalmente. Los resultados obtenidos no son concluyentes sin embargo es posible argumentar que el máximo de absorbancia en $\lambda = 186$ nm, que se observa en los resultados experimentales reportados en la publicación del Dr. Rodríguez-Gómez, es debido a la interacción de las nanopartículas de aluminio en la monocapa y con el sustrato y no al modo plasmónico dipolar de las nanopartículas de aluminio con radios por debajo de los 10 nm. Sabemos que la diferencia en los máximos de absorbancia se debe a que el modelo dipolar no es acertado para fracciones de cubierta tan altas, sin embargo en un ejercicio de extrapolar las ideas y saber si tenemos un buen resultado o no se realizó el análisis previo.

Como trabajo a futuro se propone el estudio de un modelo que permita contemplar fracciones de cubierta mayores y poder corroborar si el máximo en la absorbancia proviene de la excitación de la monocapa completa.

Apéndice A

Coeficientes de Mie

Considerando $x = ka = 2\pi Na/\lambda$ y $m = k_1/k = N_1/N$, la Ec. (1.226c) se reescribe como

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(\cos \phi \pi_n j_n(x) - i \cos \phi \tau_n \frac{[x j_n(x)]'}{x} \right) + \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i a_n \cos \phi \tau_n \frac{[x h_n^1(x)]'}{x} - b_n \cos \phi \pi_n h_n^1(x) \right) \\ = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(c_n \cos \phi \pi_n j_n(mx) - i d_n \cos \phi \tau_n \frac{[m x j_n(mx)]'}{m x} \right). \end{aligned} \quad (1)$$

De forma análoga para la Ec. (1.226c), se tiene

$$\begin{aligned} \frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(\sin \phi \pi_n j_n(x) - i \sin \phi \tau_n \frac{[x j_n(x)]'}{x} \right) + \frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i b_n \sin \phi \tau_n \frac{[x h_n^1(x)]'}{x} \right. \\ \left. - a_n \sin \phi h_n^1(x) \pi_n \right) = \frac{k_1}{\omega \mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(d_n \sin \phi \pi_n j_n(mx) - i c_n \sin \phi \tau_n \frac{[m x j_n(mx)]'}{m x} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Factorizando el campo interno de la Ec. (1), se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(\cos \phi \pi_n j_n(x) - i \cos \phi \tau_n \frac{[x j_n(x)]'}{x} + i a_n \cos \phi \tau_n \frac{[x h_n^1(x)]'}{x} - b_n \cos \phi \pi_n h_n^1(x) \right. \\ \left. - c_n \cos \phi \pi_n j_n(mx) + i d_n \cos \phi \tau_n \frac{[m x j_n(mx)]'}{m x} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

agrupando

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(\pi_n \left[\cos \phi j_n(x) - b_n \cos \phi h_n^1(x) - c_n \cos \phi j_n(mx) \right] + \tau_n \left[-i \cos \phi \frac{[x j_n(x)]'}{x} \right. \right. \\ \left. \left. + i a_n \cos \phi \frac{[x h_n^1(x)]'}{x} + i d_n \cos \phi \frac{[m x j_n(mx)]'}{m x} \right] \right) = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

3. RESULTADOS

como $E_n \neq 0$, entonces

$$\begin{aligned} \pi_n (\cos \phi j_n(x) - b_n \cos \phi h_n^1(x) - c_n j_n(mx) \cos \phi) + \tau_n \left(-i \cos \phi \frac{[xj_n(x)]'}{x} \right. \\ \left. + ia_n \cos \phi \frac{[xh_n^1(x)]'}{x} + id_n \cos \phi \frac{[mxj_n(mx)]'}{mx} \right) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

De la Ec. (5) se tiene que los términos que multiplican a π y τ cumplen que

$$\cos \phi j_n(x) - b_n \cos \phi h_n^1(x) - c_n \cos \phi j_n(mx) = 0, \quad (6)$$

$$-i \cos \phi \frac{[xj_n(x)]'}{x} + ia_n \cos \phi \frac{[xh_n^1(x)]'}{x} + id_n \cos \phi \frac{[mxj_n(mx)]'}{mx} = 0. \quad (7)$$

Multiplicando las Ecs. (6) y (7) por $\cos \phi'$ e integrando de 0 a 2π se obtienen las primeras dos ecuaciones lineales de los armónicos vectoriales que contienen a los coeficientes de expansión

$$\begin{aligned} j_n(mx)c_n + h_n^1(x)b_n = j_n(x), \\ [mxj_n(mx)]'d_n + m[xh_n^1(x)]'a_n = m[xj_n(x)]'. \end{aligned} \quad (8)$$

De forma similar para la ecuación Ec. (2)

$$\begin{aligned} \pi_n \left(\frac{k}{\omega\mu} [\sen \phi j_n(x) - a_n \sen \phi h_n^1(x)] - \frac{k_1}{\omega\mu_1} d_n j_n(mx) \sen \phi \right) + \tau_n \left(\frac{k}{\omega\mu} [-i \sen \phi \frac{[xj_n(x)]'}{x} + \right. \\ \left. ib_n \sen \phi \frac{[xh_n^1(x)]'}{x}] + \frac{k_1}{\omega\mu_1} ic_n \sen \phi \frac{[mxj_n(mx)]'}{mx} \right) = 0, \end{aligned}$$

entonces

$$\frac{k}{\omega\mu} [\sen \phi j_n(x) - a_n \sen \phi h_n^1(x)] - \frac{k_1}{\omega\mu_1} d_n \sen \phi j_n(mx) = 0, \quad (9)$$

$$\frac{k}{\omega\mu} \left(-i \sen \phi \frac{[xj_n(x)]'}{x} + ib_n \sen \phi \frac{[xh_n^1(x)]'}{x} \right) + \frac{k_1}{\omega\mu_1} ic_n \sen \phi \frac{[mxj_n(mx)]'}{mx} = 0. \quad (10)$$

Multiplicando las Ecs. (9) y (10) por $\sen \phi'$ e integrando de 0 a 2π se obtienen el segundo conjunto de ecuaciones lineales de los vectores armónicos que contienen a los coeficientes de expansión

$$\begin{aligned} \mu m j_n(mx) d_n + \mu_1 h_n^1(x) a_n = \mu_1 j_n(x), \\ \mu [mxj_n(mx)]' c_n + \mu_1 [xh_n^1(x)]' b_n = \mu_1 [xj_n(x)]'. \end{aligned} \quad (11)$$

Las expresiones de las Ecs. (8) y (11) que contienen a los coeficientes de expansión, se obtuvieron utilizando únicamente las condiciones de frontera de la Ec. (1.226) en la componente θ para \vec{E} y \vec{H} . Las mismas ecuaciones resultan si se analiza la componente ϕ , es decir, la información de las cuatro ecuaciones son redundantes, entonces:

$$\begin{aligned} j_n(mx)c_n + h_n^1(x)b_n = j_n(x), \\ \mu [mxj_n(mx)]' c_n + \mu_1 [xh_n^1(x)]' b_n = \mu_1 [xj_n(x)]', \\ \mu m j_n(mx) d_n + \mu_1 h_n^1(x) a_n = \mu_1 j_n(x), \\ [mxj_n(mx)]' d_n + m [xh_n^1(x)]' a_n = m [xj_n(x)]'. \end{aligned} \quad (12)$$

Contribución dipolar

A partir de los coeficientes de Mie calculados en la Sec. 1.6, ver Ecs. (1.237) y (1.238), dados por

$$a_n = \frac{m\Psi_n(mx)\Psi'_n(x) - \Psi_n(x)\Psi'_n(mx)}{m\Psi_n(mx)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\Psi'_n(mx)},$$

$$b_n = \frac{\Psi_n(mx)\Psi'_n(x) - m\Psi_n(x)\Psi'_n(mx)}{\Psi_n(mx)\xi'_n(x) - m\xi_n(x)\Psi'_n(mx)},$$

es posible calcular los coeficientes C_{ext} y C_{scat} , ver las Ecs. (1.253) y (1.254) dados por las siguientes expresiones

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n),$$

y

$$C_{scat} = \frac{W_{scat}}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2),$$

así como Q_{abs} con la Ec. 1.237, dado por

$$W_{abs} = W_{ext} - W_{scat},$$

donde $W_{ext} = C_{ext}/(\pi a^2)$ y $W_{scat} = C_{scat}/(\pi a^2)$, con a el radio de la partícula. Las Ecs. (1.237) y (1.238) predicen las n contribuciones multipolares para una nanopartícula de radio a embebida en un medio homogéneo. La Fig. 15 muestra las primeras 3 contribuciones multipolares para Q_{abs} , tanto para el coeficiente a_n , como para b_n , de una nanopartícula de aluminio de radio $a = 3.2$ nm, embebida en aire. De la Fig. 15(a) se observa que la contribución dominante está dada por el coeficiente a_1 con 6 ordenes de magnitud de diferencia con los coeficientes a_2 y b_1 y 11 ordenes de magnitud de diferencia con a_3 , asimismo a_1 es 12 ordenes de magnitud mayor que el coeficiente b_2

3. RESULTADOS

y 18 ordenes de magnitud mayor que b_3 . Por otra parte de los espectros de Q_{ext} , Q_{scat} , ver Figs. 15(b) y (c), se observa que nuevamente la contribución dominante está dada por el término a_1 con 2 ordenes de magnitud de diferencia con respecto al coeficiente a_2 y 4 ordenes de magnitud para el coeficiente b_1 . Los coeficientes a_3 , b_2 y b_3 son menores que a_1 por 6, 7 y 10 ordenes de magnitud respectivamente. El coeficiente a_1 da cuenta de la contribución dipolar [22], de aquí

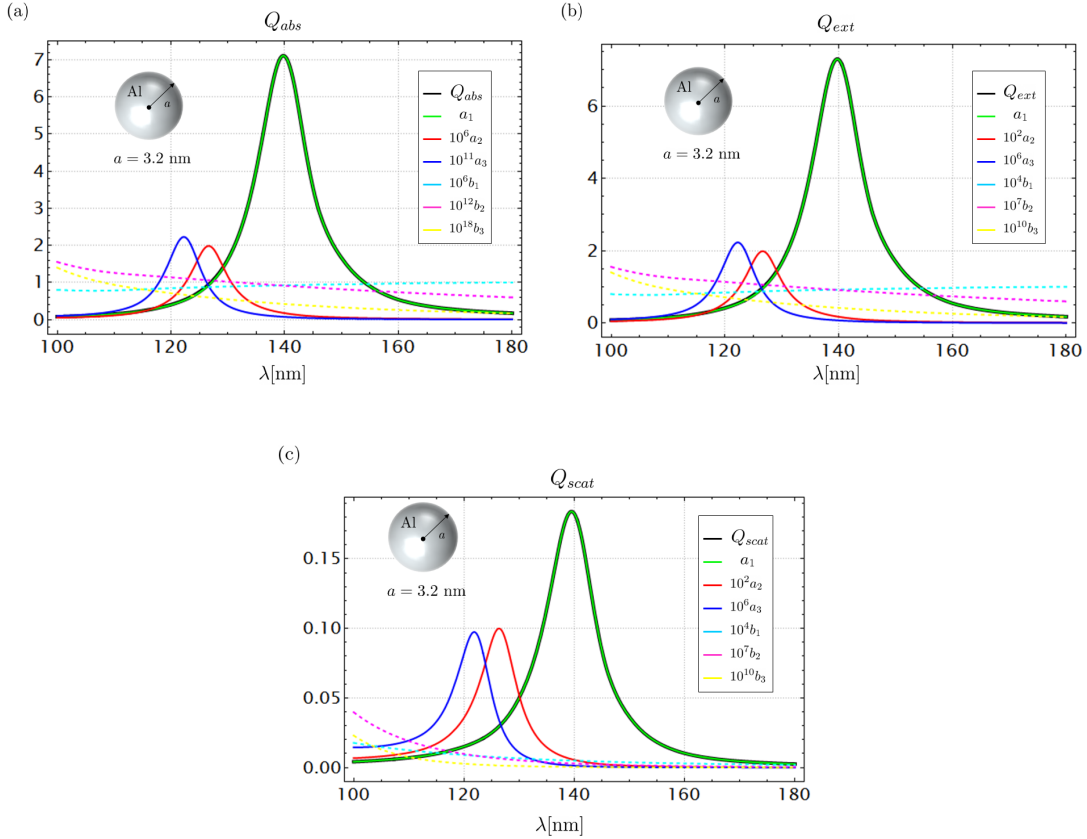


Fig. 15: Eficiencias de esparcimiento Q_{scat} , extinción Q_{ext} y absorción Q_{abs} en el intervalo $\Delta\lambda = (138 - 141)$ nm, para una nanopartícula de aluminio con radio $a = 3.2$ nm, aislada.

que la contribución multipolar dominante es la dipolar y está localizado en $\lambda_{dip}^{scat} = 139.49$ nm para Q_{scat} y $\lambda_{dip}^{abs} = 139.76$ nm para Q_{abs} y Q_{ext} .

Bibliografía

- [1] M. J. Mezziani, C. E. Bunker, F. Lu, H. Li, W. Wang, E. A. Gulians, R. A. Quinn e Y.-P. Sun. Formation and properties of stabilized aluminum nanoparticles. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **1**(3):703-709, 2009 (citado en la pág. 1).
- [2] S. Chen, Q. Zhao, L. Zhang, L. Wang, Y. Zeng y H. Huang. Combined detection of breast cancer biomarkers based on plasmonic sensor of gold nanorods. *Sens. Actuators, B*, **221**:1391-1397, 2015 (citado en la pág. 1).
- [3] M. A. Behnam, F. Emami, Z. Sobhani, O. Koochi-Hosseiniabadi, A. R. Dehghanian, S. M. Zebarjad, M. H. Moghim y A. Oryan. Novel combination of silver nanoparticles and carbon nanotubes for plasmonic photo thermal therapy in melanoma cancer model. *Advanced pharmaceutical bulletin*, **8**(1):49, 2018 (citado en la pág. 1).
- [4] P. C. Wu, W.-Y. Tsai, W. T. Chen, Y.-W. Huang, T.-Y. Chen, J.-W. Chen, C. Y. Liao, C. H. Chu, G. Sun y D. P. Tsai. Versatile polarization generation with an aluminum plasmonic metasurface. *Nano Lett.*, **17**(1):445-452, 2017 (citado en la pág. 1).
- [5] Y. Zheng, T. Thai, P. Reineck, L. Qiu, Y. Guo y U. Bach. DNA-directed self-assembly of core-satellite plasmonic nanostructures: A highly sensitive and reproducible near-IR SERS sensor. *Adv. Funct. Mater.*, **23**(12):1519-1526, 2013 (citado en la pág. 1).
- [6] T. Villesen, C Uhrenfeldt, B Johansen y A. N. Larsen. Self-assembled Al nanoparticles on Si and fused silica, and their application for Si solar cells. *Nanotech.*, **24**(27):275606, 2013 (citado en la pág. 1).
- [7] M. Schwind, C. Langhammer, B. Kasemo e I. Zorić. Nanoplasmonic sensing and QCM-D as ultrasensitive complementary techniques for kinetic corrosion studies of aluminum nanoparticles. *Appl. Surf. Sci.*, **257**(13):5679-5687, 2011 (citado en la pág. 1).
- [8] S. A. Maier. *Plasmonics: fundamentals and applications*, volumen 1. Springer, 2007 (citado en las págs. 2, 41, 42).
- [9] C. Kittel y P. McEuen. *Introduction to Solid State Physics*, volumen 8. Wiley New York, 1996 (citado en la pág. 2).
- [10] 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 (citado en la pág. 2).
- [11] R. G. Barrera, M. del Castillo-Mussot, G. Monsivais, P. Villaseor y W. L. Mochán. Optical properties of two-dimensional disordered systems on a substrate. *Phys. Rev. B: Condens. Matter*, **43**(17):13819, 1991 (citado en las págs. 4, 34, 37, 94).

- [12] E. Hecht. *Optics*. Addison Wesley, 4^o edición, 1998 (citado en la pág. 7).
- [13] M. Born y E. Wolf. *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Elsevier, 2013 (citado en las págs. 8, 13, 14, 29).
- [14] D. J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*, Fourth Edition, 2021 (citado en las págs. 9, 10, 51).
- [15] J. Bazer y R. Burridge. Energy partition in the reflection and refraction of plane waves. *SIAM J. Appl. Math.*, **34**(1):78-92, 1978 (citado en la pág. 24).
- [16] 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):12660-12683, 2018 (citado en las págs. 34, 36, 38, 41).
- [17] U. Kreibig y M. Vollmer. *Optical properties of metal clusters*, volumen 25. Springer Science & Business Media, 2013 (citado en las págs. 41, 45, 46, 48).
- [18] L. J. Mendoza Herrera, D. M. Arboleda, D. C. Schinca y L. B. Scaffardi. Determination of plasma frequency, damping constant, and size distribution from the complex dielectric function of noble metal nanoparticles. *J. Appl. Phys.*, **116**(23):233105, 2014 (citado en las págs. 43, 45).
- [19] U. Kreibig y C. V. Fragstein. The limitation of electron mean free path in small silver particles. *Zeitschrift für Physik*, **224**(4):307-323, 1969 (citado en la pág. 43).
- [20] E. D. Palik. *Handbook of optical constants of solids*, volumen 3. Academic Press, 1998 (citado en las págs. 43, 44, 46, 77, 79).
- [21] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin. *Solid state physics*. Cengage Learning, 2022 (citado en las págs. 44, 45).
- [22] C. F. Bohren y D. R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 2008 (citado en las págs. 49, 51, 52, 58, 102).
- [23] M. Abramowitz, I. A. Stegun y R. H. Romer. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, 1988 (citado en las págs. 52, 55, 57).
- [24] G. B. Arfken y H. J. Weber. *Mathematical methods for physicists*, 1999 (citado en la pág. 57).
- [25] F. G. de Abajo y A. Howie. Retarded field calculation of electron energy loss in inhomogeneous dielectrics. *Phys. Rev. B: Condens. Matter*, **65**(11):115418, 2002 (citado en las págs. 60, 63, 64, 66).
- [26] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*, volumen 31999. Wiley New York, 1977 (citado en las págs. 60, 63).
- [27] H. Fearn, D. F. James y P. W. Milonni. Microscopic approach to reflection, transmission, and the Ewald–Oseen extinction theorem. *Am. J. Phys.*, **64**(8):986-995, 1996 (citado en la pág. 63).
- [28] J. Waxenegger, A. Trügler y U. Hohenester. Plasmonics simulations with the MNPBEM toolbox: Consideration of substrates and layer structures. *Comput. Phys. Commun.*, **193**:138-150, 2015 (citado en las págs. 65, 67, 68).

- [29] M. D. P. Aguilar-Del-Valle, H. D. J. Cruz-Manjarrez y A. Rodríguez-Gómez. Simple fabrication and characterization of an aluminum nanoparticle monolayer with well-defined plasmonic resonances in the far ultraviolet. *Metals*, **8**(1):67, 2018 (citado en las págs. [67](#), [71-75](#), [77](#), [86](#), [91](#), [94](#), [95](#)).
- [30] C. T. Rueden y K. W. Eliceiri. ImageJ for the next generation of scientific image data. *Microsc. Microanal.*, **25**(S2):142-143, 2019 (citado en la pág. [72](#)).
- [31] T. Nakano, Y. Saitou y K. Oya. Transient evolution of the target erosion profile during magnetron sputtering: Dependence on gas pressure and magnetic configuration. *Surf. Coat. Technol.*, **326**:436-442, 2017 (citado en la pág. [72](#)).
- [32] D. Gall. Electron mean free path in elemental metals. *J. Appl. Phys.*, **119**(8):085101, 2016 (citado en la pág. [77](#)).
- [33] J. Lermé, C. Bonnet, M. Broyer, E. Cottancin, D. Manchon y M. Pellarin. Optical properties of a particle above a dielectric interface: cross sections, benchmark calculations, and analysis of the intrinsic substrate effects. *The Journal of Physical Chemistry C*, **117**(12):6383-6398, 2013 (citado en la pág. [79](#)).
- [34] P. Nordlander, C. Oubre, E. Prodan, K. Li y M. Stockman. Plasmon hybridization in nanoparticle dimers. *Nano Lett.*, **4**(5):899-903, 2004 (citado en las págs. [81](#), [84](#)).
- [35] S. Zhang, K. Bao, N. J. Halas, H. Xu y P. Nordlander. Substrate-induced Fano resonances of a plasmonic nanocube: a route to increased-sensitivity localized surface plasmon resonance sensors revealed. *Nano Lett.*, **11**(4):1657-1663, 2011 (citado en las págs. [82](#), [84](#)).

