



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Solución numérica de la relación de dispersión en sistemas
metafotónicos multicapa

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

por

Emmanuel Velázquez Hermenegildo

Asesorado por

Dr. Maximino Luis Arroyo Carrasco

Dr. Ricardo Téllez Limón

Puebla Pue.
07 de julio de 2025



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Solución numérica de la relación de dispersión en sistemas
metafotónicos multicapa

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

por

Emmanuel Velázquez Hermenegildo

Asesorado por

Dr. Maximino Luis Arroyo Carrasco

Dr. Ricardo Téllez Limón

Puebla Pue.
07 de julio de 2025

Título: Solución numérica de la relación de dispersión en sistemas
metafotónicos multicapa

Estudiante: EMMANUEL VELÁZQUEZ HERMENEGILDO

COMITÉ

Dra. Marcela Maribel Méndez Otero
Presidente

Dra. Emma Vianey García Ramírez
Secretario

Dr. Adalberto Alejo Molina
Vocal

Dra. Citlalli Teresa Sosa Sánchez
Vocal

Dr. Maximino Luis Arroyo Carrasco
Asesor

Dr. Ricardo Téllez Limón
Asesor

Agradecimientos

Mis profundos agradecimientos a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la beca que me fue otorgada durante este posgrado.

Muchas gracias al Dr. Luis y al Dr. Ricardo, por guiarme, orientarme y aconsejarme en todo el proceso del trabajo de investigación plasmado en este documento. Agradezco a mi comité tutorial y miembros del jurado, Dra. Maribel, Dra. Emma, Dra. Citlalli, Dr. Adalberto, por sus valiosas observaciones, sugerencias y correcciones para la presentación adecuada y mejora de este trabajo. A mis compañeros del Cuerpo Académico del Cuerpo de Óptica Cuántica y no Lineal por sus sugerencias hacia este trabajo. Mención especial para Jonathan por sus valiosos consejos y por compartir sus conocimientos conmigo. A mis profesores de cada una de las materias que cursé, por su esfuerzo diario para enseñar.

Agradezco de corazón a mis amigos y amigas, especialmente a los más cercanos, cuyas palabras de aliento, sincera amistad, apoyo incondicional y buenos ratos de esparcimiento también fueron vitales para la realización este trabajo. A Christos, Iván y Jafet por su soporte que sigue intacto desde hace muchos años y por preocuparse siempre por mí. Al buen Beto, que aunque esté lejos, siempre me desea lo mejor. A Silvana, por estar conmigo en la frenética transición hacia el posgrado, por darse tiempo de estudiar conmigo y hacerme compañía en largas noches de estudio sin importar la distancia, por animarme a rendir al máximo y por su apoyo en cada momento. A Sharon, por sus constantes y sinceras palabras de ánimo para la escritura de esta tesis y demás aspectos de mi vida académica y personal, por recordarme que la curiosidad que todos tenemos nos permite llegar muy lejos y por a inspirarme a ser más creativo.

Agradezco de corazón a Mariana, que día tras días, a pesar del poco tiempo que tenemos para convivir, me muestra su apoyo, cariño y buenos deseos para la realización de mis sueños desde hace ya tantos años. Mención especial por convertir mi tesis a HTML para los trámites necesarios.

Doy gracias a toda mi familia, a Juan por animarme a chambear duro, a mis abuelitos y abuelitas por su inquebrantable apoyo y por sus palabras para hacer las cosas correctamente y de la mejor manera. Gracias por inspirarme a esforzarme al máximo.

Agradecimientos especiales para mi mamá, a mi papá, a mi hermana, por su presencia en cada etapa de mi vida, por acompañarme en cada paso importante de mi vida profesional, por su eterno amor, cariño y apoyo incondicional en todos los sentidos posibles, por creer siempre en mí, por animarme a hacer cosas más grandes, por alentarme a superar mis propios límites, por sus sinceras palabras para seguir adelante. La emoción y alegría que muestran por mis logros me inspiran mucho. Sin ustedes, esto no hubiera sido posible. A todos ustedes, les dedico todas las incontables horas de trabajo y esfuerzo representado en este trabajo.

Índice general

Resumen	IX
1. Introducción	1
1.1. Objetivos	2
1.1.1. Objetivo general	2
1.1.2. Objetivos específicos	2
2. Marco Teórico	3
2.1. Propagación de ondas electromagnéticas en medios continuos	3
2.1.1. Ecuaciones de Maxwell	3
2.1.2. Ecuación de onda	4
2.1.3. Ecuación de Helmholtz	5
2.1.4. Conservación de componentes tangenciales	5
2.2. Coeficientes de Fresnel en dieléctricos	6
2.2.1. Polarización TE	6
2.2.2. Polarización TM	7
2.2.3. Transmitancia y reflectancia	7
2.3. Propiedades ópticas de los metales	8
2.3.1. Relaciones constitutivas	8
2.3.2. Coeficientes de Fresnel en metales	10
2.3.3. Modelos de dispersión	11
2.3.3.1. Modelo de Drude	11
2.3.3.2. Drude-Lorentz	12
2.4. Sistemas metafotónicos	12
2.4.1. Metamateriales	13
2.4.2. Sistemas metafotónicos multicapa	13
2.4.3. Relación de dispersión de sistemas metafotónicos multicapa	13
2.4.3.1. Modos electromagnéticos de polarización	15
2.4.3.2. Modos TM	15
2.4.3.3. Modos TE	15
2.4.3.4. Solución de las ecuaciones de onda para los modos TM y TE . . .	16
2.4.3.5. Relación de dispersión del sistema de una interfaz	16
2.4.3.6. Relación de dispersión de sistemas multicapa	16
2.5. Método de la matriz de transmitancia	17
2.5.1. Modos propios del sistema	19
2.5.2. Reflectancia	19
2.6. Plasmones de superficie	19
2.6.1. Plasmones polaritones de superficie	19
2.6.1.1. Plasmones polaritones de superficie en una sola interfaz	20
2.6.1.2. Reflexión Totalmente Atenuada	21

2.6.2.	Plasmones localizados de superficie	22
2.6.2.1.	Características	22
2.6.3.	Teoría de Mie	23
2.6.3.1.	Absorción y esparcimiento por una esfera	23
2.6.3.2.	Esféricos armónicos vectoriales	24
2.6.4.	Medición de PLS	26
2.7.	Técnica de Integración Finita	26
2.8.	Aproximación por el método de expansión polar de Breit-Weigner	27
3.	Solución numérica de la relación de dispersión de sistemas metafotónicos multicapa	31
3.1.	Comparación de modelos dispersivos para el oro	31
3.2.	Determinación de la frecuencia de corte para PPS	32
3.2.1.	Frecuencia de corte y teoría de Mie	32
3.2.1.1.	Modelo de Drude-Lorentz	33
3.2.1.2.	Datos experimentales	34
3.3.	Caracterización de índice de refracción de un sistema multicapa	35
3.3.0.1.	Solución numérica de la relación de dispersión	36
3.3.0.2.	Solución mediante conjuntos de nivel (necesito otro nombre más llamativo, acepto sugerencias)	37
3.3.0.3.	Algoritmo de reducción de dominio	37
3.4.	Validación del método	41
3.4.1.	Validación de métodos para sistemas con pérdidas	44
3.5.	Caracterización de sistemas cuasi-simétricos	45
4.	Reflectancia de sistemas metafotónicos multicapa con rugosidad	49
4.1.	Estudio de convergencia de CST Studio	49
4.1.1.	Dimensiones de sustrato y superestrato	49
4.1.2.	Mallado	50
4.1.3.	Coefficientes de reflexión de Fresnel	51
4.2.	Validación de CST Studio	51
4.2.1.	Sistema de cuatro capas	51
4.2.2.	Sistema con dos periodos de llenado	53
4.2.3.	Sistema con tres periodos de llenado	53
4.3.	Implementación de interfaces rugosas en CST Studio	54
4.4.	Sistema con interfaz rugosa	55
4.4.1.	Rugosidades reales	56
5.	Conclusiones	59
A.	Anexo	61
	Bibliografía	69

Resumen

Los sistemas metafotónicos multicapa son una clase de metamateriales constituidos por películas delgadas de materiales dieléctricos, metálicos o combinaciones de ambos, que exhiben respuestas ópticas complejas que no se observan en materiales naturales. A través de la modulación de la interferencia de ondas propagativas y contra-propagativas, estas estructuras permiten manipular la direccionalidad, intensidad y fase de la luz en un rango espectral de interés.

Para caracterizar la dinámica de propagación, condiciones de resonancia y regímenes de confinamiento de la luz, es necesario resolver la relación de dispersión de estos sistemas multicapa. Es decir, identificar los modos propios que pueden existir en la estructura en función de la frecuencia y número de onda de la luz.

No obstante, la resolución de la relación de dispersión en un sistema metafotónico multicapa no es una labor simple, ya que se trata de una ecuación trascendental sin solución analítica. Más aún, si se consideran las pérdidas en los materiales, es decir, si se incluye la parte imaginaria de su constante dieléctrica, se debe resolver una ecuación trascendental compleja. En este trabajo se demuestra la resolución numérica de la relación de dispersión mediante una aproximación geométrica iterativa bidimensional. La relación de dispersión del sistema multicapa es obtenida a partir del método de la matriz de transmitancia empleando modelos dispersivos teóricos y datos experimentales de la constante dieléctrica. Mediante la teoría de Mie y condiciones de frontera, se delimitan las regiones del espectro electromagnético donde las soluciones numéricas poseen relevancia física. Los resultados obtenidos se comparan contra los reportados en la literatura para sistemas de una y dos interfaces. Adicionalmente, se estudia la reflectancia de un sistema metafotónico multicapa con películas delgadas rugosas empleando la técnica de integración finita con el software comercial CST, y se compara contra sistemas ideales con interfaces planas.

Además de obtener numéricamente el índice efectivo de sistemas metafotónicos multicapa, esta tesis contribuye al entendimiento de la naturaleza de la naturaleza propagativa o evanescente de los modos, su velocidad de fase y condiciones de acoplamiento. En conjunto con el estudio del efecto de la rugosidad en las interfaces, estos resultados impulsan el diseño de dispositivos metafotónicos en condiciones más realistas para el desarrollo de tecnologías de frontera, como filtros ópticos, sensores, sistemas de modulación de fase e incluso emisores dirigidos con aplicaciones en eficiencia energética y fotónica integrada.

Capítulo 1

Introducción

La óptica es la rama de la física que estudia el comportamiento y las propiedades de la luz, este estudio puede llevarse a cabo a escalas nanométricas (nano-óptica), cuyo interés es la interacción de la luz con materiales. Una de las ramas de la nano-óptica es la plasmónica, cuyos orígenes son relativamente recientes, pues se remontan a los estudios hechos alrededor del año 1900 por los físicos alemanes Arnold Sommerfeld y Jonathan Zenneck, que estudiaban el problema de las ondas hertzianas [1, 2]. Esta rama, evolucionó durante todo el siglo XX, pero se destaca que en 1968 Kretschmann y Raether lograron la excitación de ondas de superficie de Sommerfeld [3], que reprodujeron experimentalmente lo que hoy se conoce como plasmones polaritones de superficie (PPS): ondas híbridas compuestas del acoplamiento del campo electromagnético y los electrones libre de un conductor.

Entre las estructuras que soportan estas resonancias plasmónicas se encuentran los metamateriales, materiales nanoestructurados cuyas propiedades ópticas no existen de manera intrínseca. Todo esto ha llevado al surgimiento de un nuevo campo de la física: la metafotónica, el cual, es un campo interdisciplinario que estudia la interacción de campos electromagnéticos con metamateriales micro y nanoestructurados. La combinación de estas interacciones eléctricas y magnéticas permiten, por ejemplo, modificar de manera controlada el índice de refracción de los metamateriales, incluyendo valores cercanos a cero y valores negativos. Sus aplicaciones son, por mencionar algunas: comunicaciones ópticas, recolección de energía solar, tecnología de sensores, y biofotónica [4].

Dentro de la amplia gama de metamateriales se encuentran los metamateriales multicapa estratificados separados por interfaces. Para analizar las condiciones para la excitación de resonancias plasmónicas en un sistema multicapa, es necesario dar solución a la relación de dispersión, pues permite determinar el vector de onda angular de la luz (longitud de onda, índice efectivo y ángulo de incidencia) necesario para excitar los modos del sistema.

En el caso particular donde se tienen dos medios semi-infinitos, un dieléctrico y un metal de Drude, formando una sola interfaz plana semi-infinita, es posible deducir la relación de dispersión de los plasmones polaritones de superficie analíticamente [5]. Sin embargo, en los metamateriales que constan de varias películas delgadas metálicas y dieléctricas, la relación de dispersión es una ecuación trascendental compleja, por lo que no es posible resolverla de manera analítica y es necesario la implementación de métodos numéricos que permitan obtener soluciones complejas para poder determinar los modos del sistema computacionalmente.

En este sentido, diferentes métodos numéricos han sido empleados, como el método de la secante o el método de Newton-Raphson [6, 7]. Sin embargo, la solución para la parte imaginaria de los modos no converge cuando los modos son radiativos. Es decir, solamente puede ser obtenida la parte real de los modos confinados. También han sido implementados métodos numéricos como el análisis riguroso de ondas acopladas (RCWA) o el método modal de Fourier, pero estos métodos están limitados a sistemas periódicos cuya solución es válida únicamente para medios dieléctricos [8–10].

Contar con un método numérico que permita obtener tanto la parte real como la parte imaginaria de los modos radiativos y confinados de un metamaterial multicapa, permitiría tener un análisis más profundo de las condiciones de propagación y excitación de los modos del sistema. Con un estudio riguroso de los métodos y técnicas de integración numérica para la resolución de ecuaciones trascendentales complejas se desarrollará un código numérico que permita dar solución a la relación de dispersión de sistemas multicapa con índice de refracción complejo, útil y funcional para la caracterización de sistemas metaforónicos.

En este trabajo de Tesis se plantea como hipótesis que es posible resolver la relación de dispersión de un sistema multicapa mediante la combinación del método de la matriz de transmitancia y métodos numéricos.

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivo general

Implementar métodos numéricos empleados en la solución de ecuaciones diferenciales complejas, lineales y no lineales, para dar solución a la relación de dispersión de metamateriales compuestos de sistemas multicapa que combinan películas delgadas dieléctricas y metálicas. Adicionalmente, empleando el método de la matriz de transmitancia y software comercial, se caracterizarán numéricamente diversos metamateriales para la sintonización de sus resonancias plasmónicas.

1.1.2. Objetivos específicos

- Revisar el estado del arte de los fundamentos teóricos relacionados con el desarrollo de la tesis, incluyendo fundamentos de plasmónica, óptica de Fourier, sistemas metaforónicos, modelo de Drude-Lorentz, entre otros.
- Estudiar e implementar diversos métodos numéricos para la resolución de ecuaciones diferenciales complejas lineales y no lineales.
- Desarrollar un código numérico que permita resolver la relación de dispersión de un sistema metaforónico multicapa.
- Realizar un estudio paramétrico de la variación del comportamiento de los modos (resonancias) del sistema multicapa variando sus parámetros estructurales: espesor de películas, número de películas y combinación de materiales.
- Generar curvas espectrales de reflectancia y mapas de intensidad en campo cercano de sistemas metaforónicos multicapa empleando el software comercial CST Studio.

Capítulo 2

Marco Teórico

La interacción de la luz con los materiales puede ser estudiada desde un punto de vista clásico abordado desde las ecuaciones de Maxwell sin la necesidad de recurrir a la mecánica cuántica. En esta sección se revisa la teoría necesaria para comprender la propagación de una onda en un sólo medio homogéneo, así como su propagación a lo largo de diferentes medios dieléctricos y conductores. La parte del espectro electromagnético que compete a este trabajo es el espectro visible, ubicado aproximadamente entre 400 nm y 780 nm, además de una pequeña sección del espectro infrarrojo cercano, entre 780 nm y 900 nm, [11], de manera que a lo largo de este capítulo se hace énfasis en las propiedades de la luz y los materiales en dicho ancho de banda. Se incluyen los temas necesarios para desarrollar y entender esta tesis. Si bien el lector desea profundizar sobre alguno de los temas aquí presentados, puede dirigirse a los libros de los cuales fue extraída toda la teoría presentada en este capítulo [5, 11–15]

2.1. Propagación de ondas electromagnéticas en medios continuos

2.1.1. Ecuaciones de Maxwell

Las cuatro ecuaciones de Maxwell del electromagnetismo macroscópico en su forma diferencial son:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{D} &= \rho_f, & \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0, & \nabla \times \vec{H} &= \vec{J}_f + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

ρ_f y $\vec{J}_f$ denotan densidad de carga libre y densidad de corriente libre, respectivamente.

Si sólo se consideran medios dieléctricos lineales, isótropos y no magnéticos, entonces se puede definir las siguientes relaciones constitutivas:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E}, \quad (2.2)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \mu \vec{H}, \quad (2.3)$$

donde ε es llamada la constante dieléctrica o permitividad relativa y μ la permeabilidad relativa. En el rango de frecuencias ópticas $\mu = 1$.

Otra relación lineal constitutiva es la que existe entre la densidad de corriente interna $\vec{J}$ y el campo eléctrico $\vec{E}$, definida mediante:

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}, \quad (2.4)$$

donde σ es la conductividad del medio, una constante empírica que varía de un material a otro.

2.1.2. Ecuación de onda

Se puede demostrar [11, 12], que las cuatro ecuaciones de Maxwell para el vacío pueden ser manipuladas para obtener dos expresiones vectoriales que son vitales para el estudio de la luz como onda electromagnética. En la ausencia de carga y densidad de corriente, se combina el rotacional de las ecuaciones de Faraday y de Ampère para obtener:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2}. \quad (2.5)$$

Haciendo uso de las siguientes identidades:

- $\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E}$,
- $\nabla \cdot (\varepsilon \vec{E}) = \vec{E} \cdot \nabla \varepsilon + \varepsilon \nabla \cdot \vec{E}$,

y recordando que debido a la ausencia de estímulos externos $\nabla \cdot \vec{D} = 0$, (2.5) puede ser reescrita como

$$\nabla \left(-\frac{1}{\varepsilon} \vec{E} \cdot \nabla \varepsilon \right) - \nabla^2 \vec{E} = -\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (2.6)$$

Para variaciones despreciables del perfil dieléctrico $\varepsilon = \varepsilon(\vec{r})$ sobre distancias del orden de una longitud de onda óptica, (2.6) puede ser simplificada a la ecuación central de la teoría de ondas electromagnéticas:

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (2.7)$$

Para la propagación en el vacío, $\varepsilon = 1$, se obtiene

$$\nabla^2 \vec{E} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad (2.8)$$

con su ecuación análoga para el campo magnético

$$\nabla^2 \vec{B} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}. \quad (2.9)$$

Cada componente de (2.8) y (2.9) obedece a la ecuación diferencial escalar de onda:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}, \quad (2.10)$$

con la condición de que:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}, \quad (2.11)$$

donde c es la constante universal de la velocidad de la luz.

Considerando un dieléctrico homogéneo, isótropo y libre de cargas externas, la velocidad de fase en el medio para la onda es:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon \mu}}. \quad (2.12)$$

La razón de la velocidad de una onda electromagnética en el vacío con respecto a la velocidad de la luz en un medio se conoce como el *índice de refracción absoluto*:

$$n \equiv \frac{c}{v} = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon \mu}{\varepsilon_0 \mu_0}}. \quad (2.13)$$

Polarización

Cuando un dieléctrico está inmerso en un campo eléctrico externo, la distribución de su carga interna se distorsiona, generando momentos dipolares eléctricos. Visto este efecto sobre un átomo individual, un campo eléctrico externo desplaza la nube electrónica (negativa) del átomo respecto del núcleo (positivo); en un medio constituido de átomos neutrales, el campo eléctrico externo inducirá en cada uno de los átomos un pequeño momento dipolar.

Al momento dipolar resultante por unidad de volumen en óptica se conoce como *polarizabilidad*.

$\vec{P} \equiv$ momento dipolar por unidad de volumen.

Para la mayoría de los materiales $\vec{P}$ y $\vec{E}$ son proporcionales y pueden ser relacionados mediante:

$$(\varepsilon - \varepsilon_0)\vec{E} = \vec{P}, \quad (2.14)$$

donde el desplazamiento eléctrico, con efecto de polarización incluida, se define como

$$\vec{D} \equiv \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}. \quad (2.15)$$

La conservación de carga requiere que la carga interna y densidad de corriente sean relacionadas mediante:

$$\vec{J} = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}. \quad (2.16)$$

2.1.3. Ecuación de Helmholtz

Para analizar las propiedades físicas de una onda electromagnética que se propaga a lo largo de un medio, se requiere de la ecuación de Helmholtz, la cual se deduce a partir de (2.7). Esta ecuación de onda describe el comportamiento de una onda en un sólo medio, de manera que si se estudia su propagación a lo largo de diferentes medios, debe ser resuelta en regiones separadas de ε aplicando las condiciones de frontera necesarias. Para tenerla en una forma adecuada para la descripción de ondas confinadas que se propagan, se supone una dependencia armónica del tiempo del campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{i\omega t}$, de manera que al insertar en (2.7), se obtiene

$$\nabla^2 \vec{E} + k_0^2 \varepsilon \vec{E} = 0, \quad (2.17)$$

donde $k_0 = \frac{\omega}{c}$, que es el vector de onda de la onda propagándose en el vacío. Esta ecuación es conocida como la *ecuación de Helmholtz*.

2.1.4. Conservación de componentes tangenciales

En general, los campos $\vec{E}$, $\vec{B}$, $\vec{D}$ y $\vec{H}$ serán discontinuos en una interfaz entre dos medios diferentes, o en una superficie que posea una densidad de carga σ o una densidad de corriente $\vec{K}$. La forma explícita de estas discontinuidades pueden ser deducidas de las ecuaciones de Maxwell (2.1) en su forma integral:

$$\oint_S \vec{D} \cdot d\vec{a} = Q_{f_{enc}}, \quad (2.18)$$

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{a} = 0, \quad (2.19)$$

donde $Q_{f_{enc}}$ es la carga libre encerrada en un volumen. Estas dos ecuaciones anteriores aplican sobre cualquier superficie cerrada S . Por otro lado se tiene:

$$\oint_{\mathcal{P}} \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{a}, \quad (2.20)$$

$$\oint_{\mathcal{P}} \vec{H} \cdot d\vec{l} = I_{f_{\text{enc}}} + \frac{d}{dt} \int_S \vec{D} \cdot d\vec{a}, \quad (2.21)$$

aplican para cualquier superficie encerrada por un bucle cerrado $\mathcal{P}$. $I_{f_{\text{enc}}}$ es la corriente libre encerrada en la trayectoria de integración.

En el caso de medios lineales [12], pueden ser expresados en términos de $\vec{E}$ y $\vec{B}$. Además, si no hay carga o corriente libres en la interfaz, entonces

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 E_1^\perp - \varepsilon_2 E_2^\perp &= 0, & \vec{E}_1^\parallel - \vec{E}_2^\parallel &= \vec{0}, \\ B_1^\perp - B_2^\perp &= 0, & \frac{1}{\mu_1} \vec{B}_1^\parallel - \frac{1}{\mu_2} \vec{B}_2^\parallel &= \vec{0}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Las ecuaciones (2.22) permiten estudiar ondas electromagnéticas que se propagan a lo largo de varios medios con respuesta dieléctrica diferente.

2.2. Coeficientes de Fresnel en dieléctricos

Cuando se analiza una onda que se propaga desde un medio a otro se tienen tres ondas: la incidente, la reflejada y la transmitida. La amplitud de estas puede ser comparada mediante los coeficientes de Fresnel. Se puede deducir [11] qué cantidad de la amplitud del campo eléctrico incidente será reflejada o transmitida por una interfaz plana mediante los coeficientes de Fresnel.

Este problema debe dividirse en dos casos para el campo eléctrico: 1) Cuando es perpendicular al plano de incidencia, representado por el símbolo $\perp$. 2) Cuando está contenido en el plano de incidencia, representado por el símbolo $\parallel$.

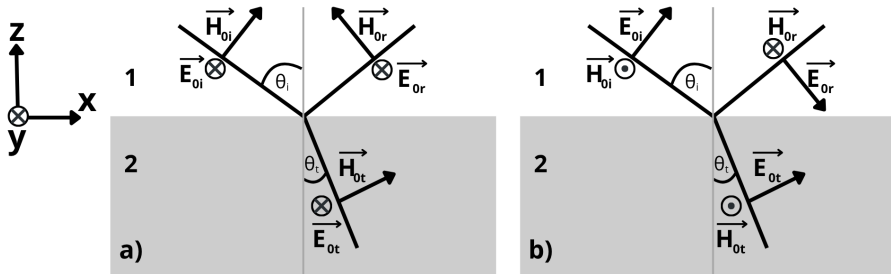


Figura 2.1: Dos casos de polarización para el campo electromagnético, cuyo plano de incidencia es el plano $x - z$. a) modo perpendicular. b) Modo paralelo.

2.2.1. Polarización TE

Cuando el campo eléctrico tiene polarización perpendicular al plano de incidencia, suele denominarse modo de polarización *TE* o *s* (del alemán, *Senkrecht*, que significa perpendicular). Los coeficientes de Fresnel para la transmisión y reflexión son:

$$t_\perp = \left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right)_\perp = + \frac{2 \sin \theta_i \cos \theta_t}{\sin (\theta_i + \theta_t)}, \quad (2.23)$$

y

$$r_\perp = \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)_\perp = - \frac{\sin (\theta_i - \theta_t)}{\sin (\theta_i + \theta_t)}, \quad (2.24)$$

donde E_{0i} , E_{0t} y E_{0r} son las amplitudes del campo electromagnético incidente, transmitido y reflejado, respectivamente. θ_i y θ_t corresponden al ángulo incidente y reflejado, respectivamente, respecto de la normal a la superficie. θ_t puede ser obtenido mediante la Ley de Snell.

2.2.2. Polarización TM

Cuando el campo eléctrico tiene polarización paralela al plano de incidencia, suele denominarse modo de polarización *TM* o *p* (del alemán, *Parallel*, que significa paralelo.) Se tiene que los coeficientes de reflexión y transmisión son:

$$t_{\parallel} = \left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right)_{\parallel} = + \frac{2 \sin \theta_t \cos \theta_i}{\sin(\theta_i + \theta_t) \cos(\theta_i - \theta_t)} \quad (2.25)$$

$$r_{\parallel} = \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)_{\parallel} = + \frac{\tan(\theta_i - \theta_t)}{\tan(\theta_i + \theta_t)} \quad (2.26)$$

Es conveniente realizar un análisis gráfico del comportamiento de los coeficientes de Fresnel. Se consideran dos casos: 1) Luz incidente desde un medio hacia otro con mayor índice de refracción ($n_i < n_t$); 2) Luz incidente desde un medio hacia otro con menor índice de refracción ($n_i > n_t$). n_i denota el medio desde donde incide la luz, n_t indica el medio al cual se transmite la luz. El índice de mayor valor es $n_{>} = 1.5$, y el de menor es $n_{<} = 1$. Se usa $r_{\perp} = r_s$ y $r_{\parallel} = r_p$.

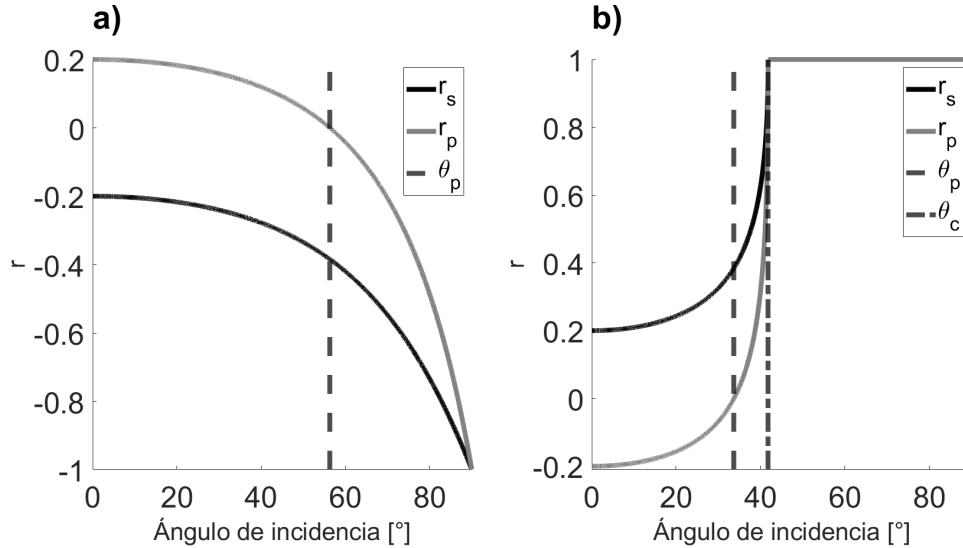


Figura 2.2: a) Coeficientes de reflexión de Fresnel correspondientes al caso $n_i < n_t$. b) Coeficientes de reflexión de Fresnel correspondientes al caso $n_i > n_t$.

θ_p es el ángulo de polarización, a este ángulo de incidencia, el coeficiente de reflexión r_p se extingue. θ_c es el ángulo crítico. Para ángulos $\geq \theta_c$, ocurre el fenómeno de Reflexión Total Interna: cuando se incide luz desde un medio hacia otro con menor índice de refracción con un ángulo mayor o igual que el índice de refracción, toda la luz incidente se reflejará en la interfaz. En la Reflexión Total Interna se genera una onda evanescente en la interfaz.

2.2.3. Transmitancia y reflectancia

No es posible medir directamente la amplitud del campo eléctrico proveniente de una fuente de luz. Lo que sí puede medirse experimentalmente es la Irradiancia (potencia por unidad de área),

la cual es proporcional al cuadrado de la amplitud del campo electromagnético

$$I \propto E_0^2. \quad (2.27)$$

La potencia de una fuente de luz puede ser medida en términos de los coeficientes de Fresnel. Se define la Transmitancia como el cociente entre la potencia transmitida y la potencia incidente como:

$$T = \left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right)^2 = \left(\frac{n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i} \right)^2 t^2. \quad (2.28)$$

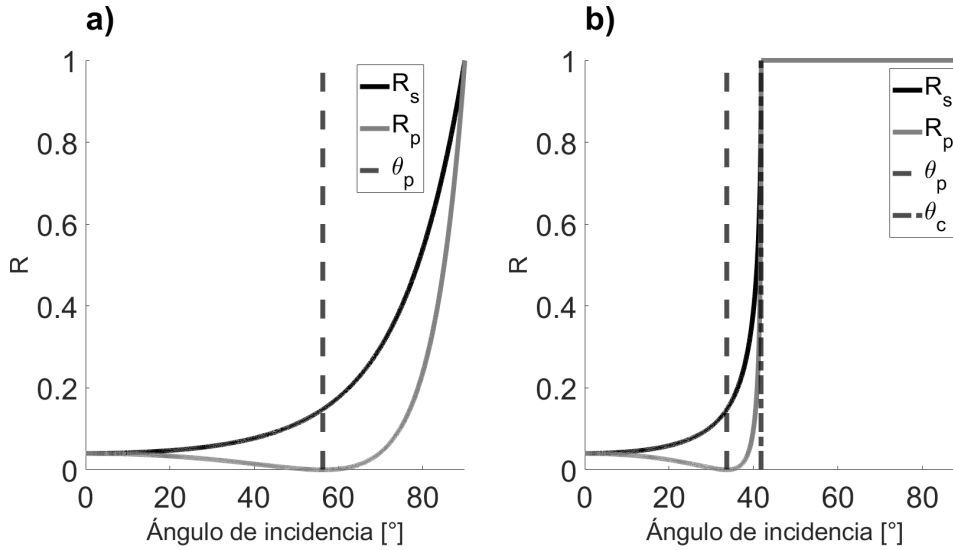


Figura 2.3: a) Reflectancia correspondiente al caso $n_i < n_t$. b) Reflectancia correspondiente al caso $n_i > n_t$

Por otra parte se define la Reflectancia como el cociente entre la potencia reflejada y la potencia incidente como:

$$R = \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)^2 = r^2. \quad (2.29)$$

La reflectancia se puede definir de manera individual para ambos modos de polarización del campo electromagnético: $R_s = r_s^2$ y $R_p = r_p^2$. Nuevamente se pueden analizar los casos para luz incidente de un medio hacia otro en los casos $n_i < n_t$ y $n_i > n_t$.

2.3. Propiedades ópticas de los metales

2.3.1. Relaciones constitutivas

En los metales, la respuesta óptica depende de la frecuencia de la luz incidente, así que se debe tomar en cuenta la no-localidad en el espacio y tiempo generalizando las relaciones constitutivas (2.2) y (2.3) a:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \int dt' d\vec{r}' \epsilon(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t'), \quad (2.30)$$

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \int dt' d\vec{r}' \sigma(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t'), \quad (2.31)$$

$\epsilon_0 \epsilon$ y σ por lo tanto, describen la respuesta al impulso de la respectiva relación lineal.

Las ecuaciones (2.30) y (2.31) se simplifican de manera significativa al tomar la transformada de Fourier con respecto a $\int dt d\vec{r} e^{i(\vec{K}\cdot\vec{r}' - \omega t)}$, convirtiendo a las convoluciones en multiplicaciones bajo el teorema de convoluciones [16].

Esto conduce a las relaciones constitutivas en el dominio de Fourier:

$$\vec{D}(\vec{K}, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{K}, \omega) \vec{E}(\vec{K}, \omega), \quad (2.32)$$

$$\vec{J}(\vec{K}, \omega) = \sigma(\vec{K}, \omega) \vec{E}(\vec{K}, \omega). \quad (2.33)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (2.15), (2.16), (2.32) y (2.33) y dado que en el dominio de Fourier $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega$, se llega a la relación fundamental entre la permitividad relativa (que de ahora en adelante será llamada *función dieléctrica*) y la conductividad:

$$\varepsilon(\vec{K}, \omega) = 1 + \frac{i\sigma(\vec{K}, \omega)}{\varepsilon_0 \omega}. \quad (2.34)$$

En la interacción de luz con metales, la forma general de la respuesta dieléctrica $\varepsilon(\omega, \vec{K})$ puede ser simplificada al límite de respuesta espacialmente local mediante $\varepsilon(\vec{K} = \vec{0}, \omega) = \varepsilon(\omega)$ [5]. La simplificación es válida siempre y cuando la longitud de onda λ en el material sea significativamente más grande que todas las dimensiones características del material, por ejemplo, las celdas estructurales del metal.

La característica sobresaliente de los materiales conductores es la presencia de cargas eléctricas libres (es decir, son capaces de circular por dentro del material), siendo los electrones libres en el caso de los metales. Estos electrones constituyen una corriente, de manera que la corriente por unidad de área está relacionada con la conductividad del medio por la ecuación (2.4). Para los dieléctricos no hay electrones libres o de conducción y $\sigma = 0$, mientras que para los metales reales la conductividad es diferente de cero ($\sigma \neq 0$) y finita.

Un conductor perfecto idealizado tendría una conductividad infinita, lo que equivale a decir que los electrones, impulsados a oscilar por una onda armónica, simplemente seguirían las alteraciones del campo, es decir, no habría fuerza de absorción. En la realidad, los electrones libres sufren de colisiones con la red agitada térmicamente o con imperfecciones, y al hacerlo, convierten de manera irreversible la energía electromagnética en calor. *La absorción de energía por un material es una función de su conductividad.*

El cambio de $\vec{E}$ con el tiempo genera un voltaje, las corrientes circulan, lo que provoca que en un material resistivo la luz se convierta en energía térmica y que haya absorción. Esta expresión puede reducirse a la ecuación de onda no atenuada si la permitividad se reformula como una cantidad compleja, lo que lleva al índice de refracción complejo, que es equivalente a decir absorción:

$$\tilde{n} = n + i\kappa, \quad (2.35)$$

κ es llamado el coeficiente de extinción y determina la absorción óptica de las ondas electromagnéticas propagándose en un medio [11].

En general

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r(\omega) + i\varepsilon_i(\omega), \quad (2.36)$$

y

$$\sigma(\omega) = \sigma_r(\omega) + i\sigma_i(\omega), \quad (2.37)$$

son funciones complejas que dependen de la frecuencia angular ω , relacionadas mediante la ecuación (2.34).

A frecuencias ópticas, ε puede ser determinado experimentalmente, por ejemplo, mediante estudios de reflectividad y la determinación del índice de refracción complejo $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$ del medio, definido como $\tilde{n} = \sqrt{\varepsilon}$. Esto conduce a las siguientes relaciones:

$$\varepsilon_r = n^2 - \kappa^2, \quad (2.38)$$

$$\varepsilon_i = 2n\kappa, \quad (2.39)$$

$$n^2 = \frac{\varepsilon_r}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2}, \quad (2.40)$$

κ se relaciona con el coeficiente absorción de la Ley de Beer, la cual describe la atenuación exponencial de la intensidad de un haz propagándose dentro de un medio. Esta ley está escrita en términos de la irradiancia, donde la irradiancia es proporcional al cuadrado de la amplitud

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha x}, \quad (2.41)$$

donde

$$\alpha(\omega) = \frac{2\kappa(\omega)\omega}{c}. \quad (2.42)$$

Por lo tanto, la parte imaginaria ε_2 de la función dieléctrica determina la cantidad de absorción dentro del medio.

2.3.2. Coeficientes de Fresnel en metales

Como ya se mencionó, los metales a diferencia de los dieléctricos, poseen índice de refracción complejo, dado por la ecuación (2.35). Para el oro [17], en el rango de frecuencias óptica e infrarrojo cercano, la parte real suele ser menor a 1 y mayor que cero, $0 < \text{Re}[\tilde{n}] < 1$; por otro lado, la parte imaginaria es mayor que 1, $\text{Im}[\tilde{n}] > 1$.

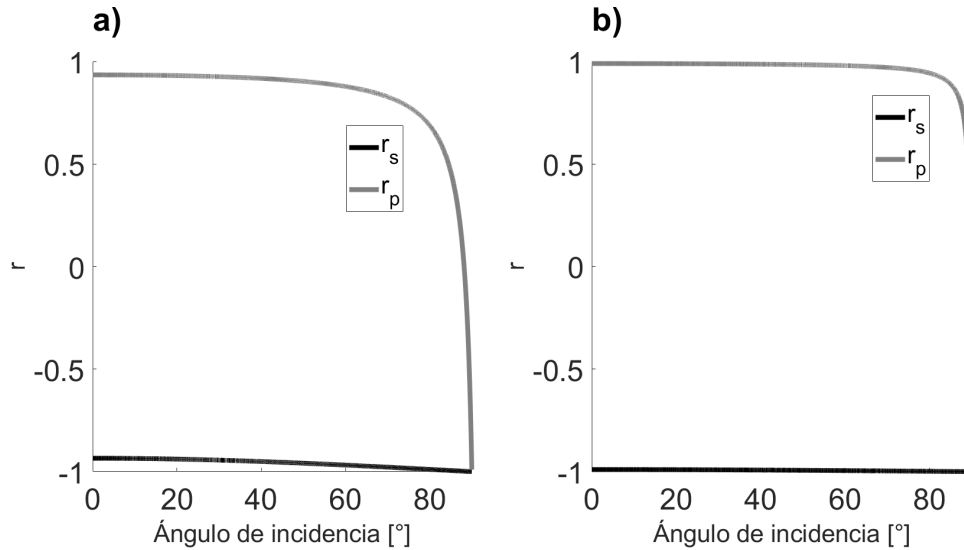


Figura 2.4: Coeficientes de reflexión de Fresnel para luz incidente desde un medio con $n_i = 1$ hacia una capa de oro a a) 575 nm con $n_t = 0.29419 + 2.9353i$, b) 900 nm con $n_t = 0.18562 + 6.0164i$.

Véase de la Figura (2.4) que el coeficiente correspondiente a luz incidente con polarización s tiene valores inferiores a 1 para ambas longitudes de onda, $r_s < 1$, lo cual indica que la luz, a cualquier ángulo de incidencia entre 0 y 90, es reflejada hacia el medio n_i con una diferencia de fase de π [11]. Mientras tanto, el coeficiente r_p tiene valores positivos para la mayoría de los ángulos de incidencia, pero decae rápidamente al superar los 80, pasando en algún punto por $r_p = 0$ y llegando a valer -1 para ángulos rasantes (cerca a 90).

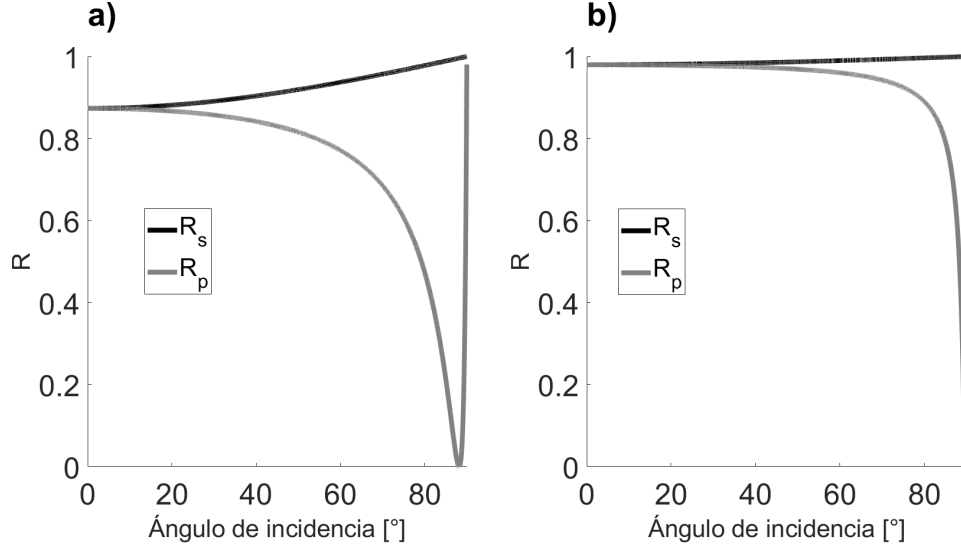


Figura 2.5: Reflectancia para luz incidente desde un medio con $n_i = 1$ hacia una capa de oro a a) 575 nm con $n_t = 0.29419 + 2.9353i$, b) 900 nm con $n_t = 0.18562 + 6.0164i$.

Reflectancia en metales

De la Figura (2.5) se observa que la reflectancia para el modo s siempre es cercana a 1, $R_p \approx 1$, lo que significa que la energía electromagnética incidente en el metal para dicha polarización regresará casi en su totalidad hacia el medio dieléctrico. Para la polarización p , el campo electromagnético también regresará hacia el medio dieléctrico casi en su totalidad para ángulos de incidencia pequeños o para ángulos rasantes.

2.3.3. Modelos de dispersión

Dado que la respuesta dieléctrica de los metales depende de la frecuencia de la luz con la cual interactúa, es necesario describir mediante algún modelo el comportamiento de los metales a frecuencias ópticas.

2.3.3.1. Modelo de Drude

Para frecuencias cercanas al infrarrojo, la relación de dispersión de varios metales puede ser descrita mediante el modelo de Drude, modelo propuesto por Paul Drude en 1900 para describir las propiedades de transporte de los electrones en los metales; este modelo considera que los electrones de valencia de los átomos son libres [18].

Un electrón perteneciente a un plasma puede ser estudiado como un oscilador con amortiguamiento, el cual está sujeto a un campo eléctrico $\vec{E}$ externo:

$$m\ddot{\vec{x}} + m\gamma\dot{\vec{x}} = -e\vec{E}. \quad (2.43)$$

donde $m \approx 9.1 \times 10^{-31}$ kg es la masa de un electrón, $e \approx -1.6 \times 10^{-19}$ C es la carga elemental del electrón, $\gamma = \frac{1}{\tau}$ es el coeficiente de amortiguamiento, y τ es el tiempo de relajación del gas de electrones libres.

Para un campo incidente con dependencia temporal $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$, una solución particular de la ecuación es $x(t) = x_0 e^{-i\omega t}$. La amplitud compleja x_0 incorpora cualquier cambio de fase entre

el campo incidente y la respuesta mediante:

$$\vec{x}(t) = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \vec{E}(t). \quad (2.44)$$

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

$$\vec{P} = -\frac{ne^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \vec{E}, \quad (2.45)$$

Se considera la polarización debida únicamente a electrones libres,

$$\vec{P}_\infty = \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)\vec{E}, \quad (2.46)$$

y se inserta esta expresión para $\vec{P}$ en la ecuación (2.15):

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right) \vec{E}, \quad (2.47)$$

donde

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m}, \quad (2.48)$$

es la *frecuencia de plasma* del gas de electrones libres. Así se llega al resultado deseado, la función dieléctrica del gas de electrones libres [5]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (2.49)$$

2.3.3.2. Drude-Lorentz

Cuando se requiere estudiar frecuencias en el rango óptico, el modelo de Drude deja de ser preciso. Entonces, para tratar las limitaciones de este modelo se suma uno (o varios) términos Lorentzianos a la ecuación (2.49). Por ejemplo, el modelo de Drude-Lorentz restringido a sólo un término lorentziano adicional para el oro a frecuencias ópticas es bien descrito [18] mediante:

$$\varepsilon_{DL}(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_D^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} - \frac{\Delta\varepsilon\Omega_L^2}{(\omega^2 - \Omega_L^2) + i\Gamma_L\omega}, \quad (2.50)$$

donde ω_D y γ_D son la frecuencia de plasma y coeficiente de amortiguamiento del modelo de Drude, respectivamente; Ω_L y Γ_L son la fuerza y anchura espectral del oscilador de Lorentz; $\Delta\varepsilon$ puede ser interpretado como un factor de ponderación. Este modelo puede ser aceptado para energías por debajo de 2.39 eV (longitudes de onda más grandes que 520 nm).

2.4. Sistemas metafotónicos

La metafotónica es la rama de la física que estudia la interacción y control del campo electromagnético con metamateriales: materiales nanoestructurados artificialmente que poseen propiedades físicas que no exhiben de manera natural. El prefijo *meta* significa *más allá*, y en este contexto la metafotónica estudia fenómenos físicos que van más allá de la óptica tradicional.

2.4.1. Metamateriales

El estudio tradicional de la óptica y fotónica involucra materiales naturales y estructuras ópticas convencionales, donde el campo eléctrico y las interacciones eléctricas desempeñan el rol dominante en la interacción de la luz visible con la materia, donde la permitividad eléctrica y la permeabilidad magnética son cantidades físicas con valor positivo $\epsilon, \mu > 0$, por ende, el índice de refracción en dichas interacciones es positivo $n > 0$.

Por otra parte, en la metafotónica la combinación de interacciones eléctricas y magnéticas, asimismo como la interacción de la luz visible con nanoestructuras artificiales, permite la manipulación de los valores de ϵ y μ a valores positivos y/o negativos, dando lugar posiblemente a valores negativos del índice de refracción. Es posible clasificar a los materiales según sus propiedades electromagnéticas descritas por los signos de ϵ y μ [4].

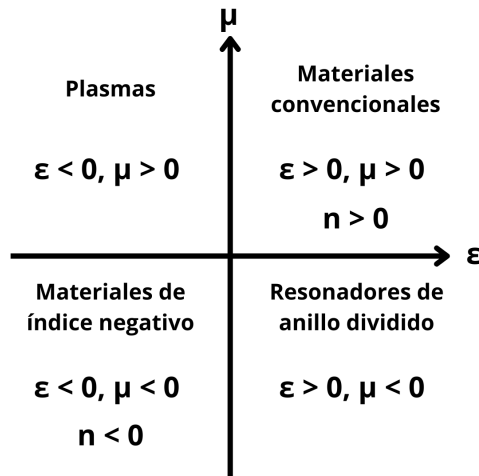


Figura 2.6: Clasificación de materiales según el signo de ϵ y μ

La clase de materiales en la que se centra este trabajo es en una combinación de materiales plasmónicos y convencionales (véase Figura 2.6). Así, los desarrollos contenidos en este trabajo están dentro del área de la nanoplasmónica.

2.4.2. Sistemas metafotónicos multicapa

Dentro de la amplia gama de metamateriales que pueden ser estructurados, están los sistemas multicapa, los cuales están compuestos por capas dieléctricas y conductoras apiladas una sobre otra dispuestas en arreglos periódicos o no periódicos. Estas capas pueden ser del orden de decenas o centenas de nanómetros. La combinación de diferentes materiales y espesores da lugar a diferentes propiedades ópticas, y permite excitar diferentes modos del sistema.

Un sistema metafotónico multicapa puede ser visto como un todo, como en la Figura (2.7), caracterizando el índice de refracción efectivo complejo para los diferentes modos del sistema y considerando que todas las capas interiores forman una sola capa intermedia emparedada entre el sustrato y el sustrato.

2.4.3. Relación de dispersión de sistemas metafotónicos multicapa

Para deducir la relación de dispersión de un sistema multicapa, se debe considerar la continuidad del campo electromagnético en cada una de sus interfaces. Por simplicidad, se supone un problema de una dimensión con una sola interfaz donde ϵ sólo depende de una coordenada espacial. Las ondas se propagan a lo largo de la dirección x de un sistema de coordenadas cartesianas, y no

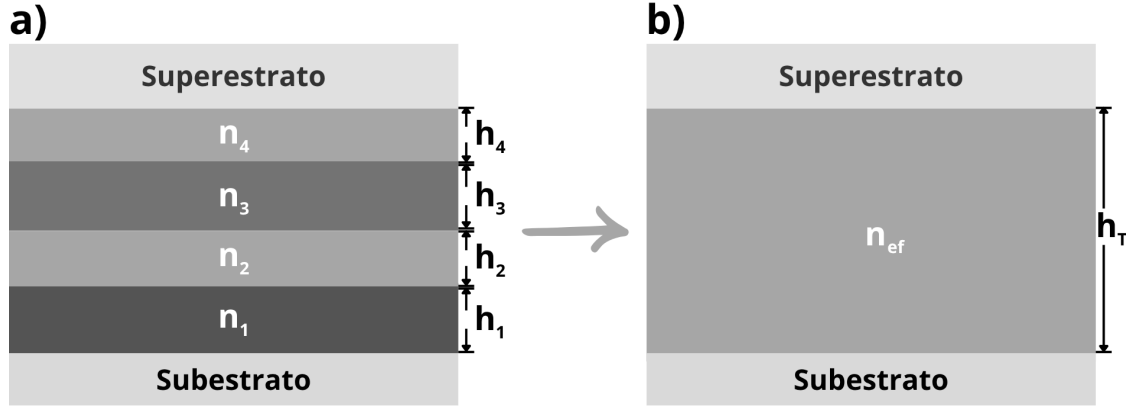


Figura 2.7: a) Sistema metafotónico multicapa. Cada capa posee su propio espesor e índice de refracción. b) Se puede ver al sistema a) como un solo sistema que posee su propio índice efectivo.

muestran variación en la dirección y , de manera que $\varepsilon = \varepsilon(z)$. Para $z > 0$ se tiene un medio con cuya respuesta dieléctrica es dada por ε_2 , mientras que para $z < 0$ se tiene otro medio, con función dieléctrica ε_1 .

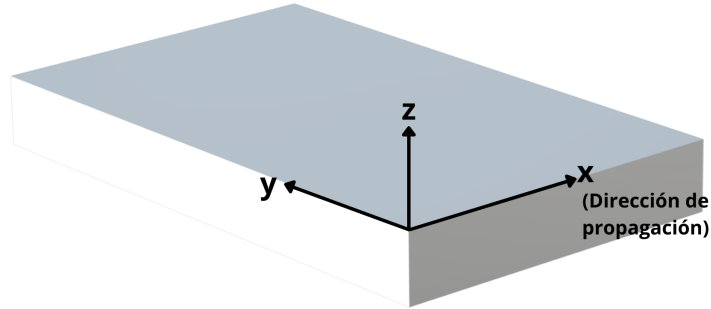


Figura 2.8: Geometría de propagación

El plano $z = 0$ coincide con la interfaz que contiene a las ondas que se propagan a lo largo del sistema, las cuales se pueden describir mediante:

$$\vec{E}(x, y, z) = \vec{E}(z)e^{i\beta x}, \quad (2.51)$$

donde una vez introducida la parte temporal, la expresión completa para el campo eléctrico es:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(z)e^{i\beta x}e^{i\omega t} = \vec{E}(z)e^{i(\beta x + \omega t)}. \quad (2.52)$$

El parámetro complejo, $\beta = k_x$, es el vector de onda de las ondas propagativas a lo largo de la dirección de propagación $\hat{x}$. Insertando (2.51) en la ecuación de Helmholtz se obtiene la forma deseada de la ecuación de onda, una ecuación de onda espacial:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}(z)}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) \vec{E} = 0. \quad (2.53)$$

Existe una ecuación análoga para el campo magnético $\vec{H}$. La ecuación (2.53) es el punto de partida para el análisis de modos electromagnéticos en guías de ondas. Introduciendo la ecuación (2.52) en

la ley de Faraday y la ley de Ampere (2.1), se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$-\frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu_0 H_x, \quad (2.54)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega\mu_0 H_y, \quad (2.55)$$

$$i\beta E_y = i\omega\mu_0 H_z, \quad (2.56)$$

$$-\frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_x, \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_y, \quad (2.58)$$

$$i\beta H_y = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_z. \quad (2.59)$$

2.4.3.1. Modos electromagnéticos de polarización

Se puede demostrar que este sistema de ecuaciones permite dos conjuntos de soluciones auto-consistentes con diferentes propiedades de polarización de las ondas que se propagan. El primer conjunto son los modos magnéticos transversales, llamados TM o p, donde sólo los componentes de campo E_x , E_z y H_y son diferentes de cero, perteneciendo a este modo las ecuaciones (2.55), (2.57) y (2.59); el segundo conjunto son los modos eléctricos transversales, llamados TE o s, donde sólo los componentes de campo H_x , H_z y E_y son diferentes de cero, al cual le corresponden la ecuaciones (2.54), (2.56) y (2.58).

2.4.3.2. Modos TM

Para los modos TM, de (2.57) y (2.59) se despeja E_x y E_z , respectivamente:

$$E_x = -i\frac{1}{\omega\varepsilon_0\varepsilon}\frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad (2.60)$$

$$E_z = -\frac{\beta}{\omega\varepsilon_0\varepsilon}H_y, \quad (2.61)$$

y se sustituyen en (2.55) para obtener la ecuación de onda para los modos TM

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + (k_0^2\varepsilon - \beta^2) H_y = 0. \quad (2.62)$$

2.4.3.3. Modos TE

Para los modos TE, de (2.54) y (2.56) se despejan los componentes del campo magnético:

$$H_x = i\frac{1}{\omega\mu_0}\frac{\partial E_y}{\partial z}, \quad (2.63)$$

$$H_z = \frac{\beta}{\omega\mu_0}E_y, \quad (2.64)$$

y se sustituyen en (2.58) para obtener la ecuación de onda para los modos TE

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + (k_0^2\varepsilon - \beta^2) E_y = 0. \quad (2.65)$$

2.4.3.4. Solución de las ecuaciones de onda para los modos TM y TE

Nótese que (2.62) y (2.65) son similares, ambas tienen la forma

$$\frac{\partial^2 F_y}{\partial z^2} - k^2 F_y = 0,$$

donde se define $(k_0^2 \varepsilon - \beta^2) = -k^2$.

Se propone que la solución a la ecuación de onda sea de la forma $F_y = e^{i\beta x} e^{\lambda z}$, lo que lleva a dos posibles resultados:

$$\lambda_1 = k, \quad \lambda_2 = -k.$$

Entonces, las soluciones particulares a la ecuación de onda son:

$$F_{y,1} = A_1 e^{i\beta x} e^{kz} \quad (2.66)$$

$$F_{y,2} = A_2 e^{i\beta x} e^{-kz} \quad (2.67)$$

Por lo tanto, la solución general a la ecuación diferencial es la suma de (2.66) y (2.67):

$$F_y = A_1 e^{i\beta x} e^{kz} + A_2 e^{i\beta x} e^{-kz}. \quad (2.68)$$

2.4.3.5. Relación de dispersión del sistema de una interfaz

En el sistema de una interfaz, el par de ecuaciones (2.66) y (2.67) describen al campo magnético H_y y el campo eléctrico E_y para los modos TM y TE, respectivamente. Sustituyendo (2.66) y (2.67) en (2.60-2.62) se obtiene el conjunto de ecuaciones que describen al campo electromagnético del modo TM. Por otra parte, (2.66) y (2.67) en (2.63-2.65) se obtiene el conjunto de ecuaciones que describen al campo electromagnético del modo TE. Analizando la continuidad del campo electromagnético en la interfaz, se obtendrá la relación de dispersión correspondiente a cada modo. Para el modo TM se obtiene:

$$\frac{\varepsilon_2 \sqrt{\varepsilon_1 k_0^2 - \beta^2}}{\varepsilon_1 \sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}} + 1 = 0, \quad (2.69)$$

mientras que para el modo TE se obtiene,

$$\frac{\sqrt{\varepsilon_1 k_0^2 - \beta^2}}{\sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}} + 1 = 0. \quad (2.70)$$

2.4.3.6. Relación de dispersión de sistemas multicapa

Para sistemas de más de una interfaz, se tiene que analizar la continuidad del campo electromagnético para cada interfaz y resolver simultáneamente las ecuaciones que describen cada interfaz. Por ejemplo, para un sistema de dos interfaces se tiene para el modo TM:

$$\begin{aligned} e^{-z \sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2} i} \left(\frac{\varepsilon_2 \sqrt{\varepsilon_1 k_0^2 - \beta^2}}{\varepsilon_1 \sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}} + 1 \right) \left(\frac{\varepsilon_3 \sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}}{\varepsilon_2 \sqrt{\varepsilon_3 k_0^2 - \beta^2}} + 1 \right) \\ + e^{z \sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2} i} \left(\frac{\varepsilon_2 \sqrt{\varepsilon_1 k_0^2 - \beta^2}}{\varepsilon_1 \sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}} - 1 \right) \left(\frac{\varepsilon_3 \sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}}{\varepsilon_2 \sqrt{\varepsilon_3 k_0^2 - \beta^2}} - 1 \right) = 0, \end{aligned} \quad (2.71)$$

y para el modo TE

$$e^{-z\sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}i} \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_1 k_0^2 - \beta^2}}{\sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}} + 1 \right) \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}}{\sqrt{\varepsilon_3 k_0^2 - \beta^2}} + 1 \right) + e^{z\sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}i} \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_1 k_0^2 - \beta^2}}{\sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}} - 1 \right) \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_2 k_0^2 - \beta^2}}{\sqrt{\varepsilon_3 k_0^2 - \beta^2}} - 1 \right) = 0, \quad (2.72)$$

donde la primera interfaz se supone que la primera interfaz está ubicada en $z = 0$ como en la Figura (2.8), y z es la posición de la segunda interfaz, que se ubica en algún punto tal que $z > 0$.

2.5. Método de la matriz de transmitancia

El método de la Matriz de Transmitancia describe cómo se transmite una onda electromagnética a través de diferentes medios separados por interfaces idealmente planas.

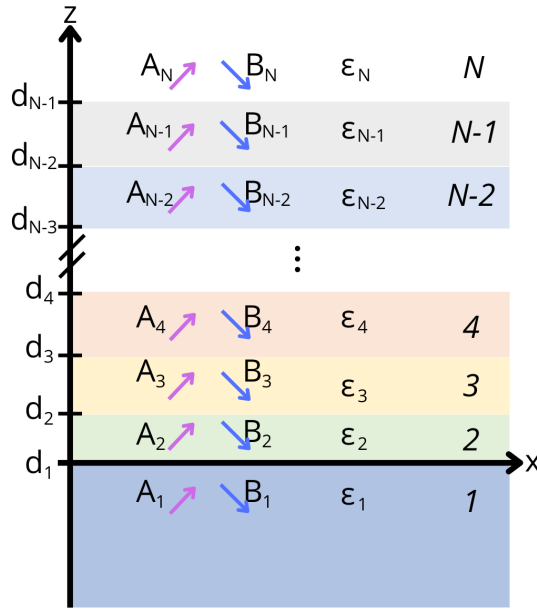


Figura 2.9: Sistema multicapa con interfaces planas. Cada estrato puede tener espesores diferentes en la dirección z

Considerando el sistema mostrado en la figura (2.9), el método de la matriz T plantea una ecuación de onda para describir el campo electromagnético de la siguiente forma:

$$\psi_m(x, z, \omega) = A_m e^{i(\beta_m x + \alpha_m z)} e^{i\omega t} + B_m e^{i(\beta_m x - \alpha_m z)} e^{i\omega t}. \quad (2.73)$$

donde A_m y B_m son las amplitudes de las ondas propagativas y contra propagativas, respectivamente. α_m y β_m son los componentes del vector de onda a lo largo de los ejes z y x , respectivamente. Nótese que esta ecuación tiene la forma de la ecuación deducida en la sección anterior (2.68).

Los componentes del vector de onda satisfacen la relación constitutiva:

$$\beta_m(\alpha_m) = \sqrt{k_0^2 \varepsilon_m(\omega) - \alpha_m^2}. \quad (2.74)$$

Considerando medios separados por interfaces planas, se analiza la continuidad del campo electromagnético en cada interfaz, esto es con las condiciones de frontera:

$$\psi_m(x, z, \omega)|_{z=d_m} = \psi_{m+1}(x, z, \omega)|_{z=d_m} \quad (2.75)$$

$$\frac{1}{\nu_m} \frac{\partial \psi_m(x, z, \omega)}{\partial z} \Big|_{z=d_m} = \frac{1}{\nu_{m+1}} \frac{\partial \psi_m(x, z, \omega)}{\partial z} \Big|_{z=d_{m+1}}, \quad (2.76)$$

donde $\nu_m = 1$ corresponde a una onda con polarización s , y $\nu_m = \varepsilon(\omega)$ corresponde a una onda con polarización p .

Se analiza la continuidad del campo electromagnético para una sola interfaz. Para una onda acoplada para los dos medios se tiene $\beta_m = \beta_{m+1}$. Definiendo $k_m = \alpha_m d_m$ y $k_m = \alpha_{m+1} d_m$ se obtienen de (2.75) y (2.76):

$$A_m e^{ik_m} + B_m e^{-ik_m} = A_{m+1} e^{ik_{m+1}} + B_{m+1} e^{-ik_{m+1}}, \quad (2.77)$$

$$\gamma_m (A_m e^{ik_m} - B_m e^{-ik_m}) = A_{m+1} e^{ik_{m+1}} - B_{m+1} e^{-ik_{m+1}}, \quad (2.78)$$

donde $\gamma_m = \frac{\alpha_m}{\nu_m} \frac{\nu_{m+1}}{\alpha_{m+1}}$. Las dos ecuaciones anteriores se pueden escribir en una sola matriz de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} e^{ik_m} & e^{-ik_m} \\ \gamma e^{ik_m} & -\gamma e^{-ik_m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_{m+1}} & e^{-ik_{m+1}} \\ e^{ik_{m+1}} & -e^{-ik_{m+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{m+1} \\ B_{m+1} \end{pmatrix}$$

Resolviendo el sistema para $\begin{pmatrix} A_{m+1} \\ B_{m+1} \end{pmatrix}$ se obtiene:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \gamma_m) e^{i(k_m - k_{m+1})} & (1 - \gamma_m) e^{-i(k_m + k_{m+1})} \\ (1 - \gamma_m) e^{i(k_m + k_{m+1})} & (1 + \gamma_m) e^{-i(k_m - k_{m+1})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{m+1} \\ B_{m+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix}, \quad (2.79)$$

y se define:

$$T_m = \begin{pmatrix} (1 + \gamma_m) e^{i(k_m - k_{m+1})} & (1 - \gamma_m) e^{-i(k_m + k_{m+1})} \\ (1 - \gamma_m) e^{i(k_m + k_{m+1})} & (1 + \gamma_m) e^{-i(k_m - k_{m+1})} \end{pmatrix}.$$

Así, para un sistema de una sola interfaz las amplitudes de entrada y de salida del sistema se relacionan mediante como:

$$\frac{1}{2} T_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (2.80)$$

Agregando una segunda interfaz al sistema entonces se obtiene:

$$\frac{1}{2} T_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad (2.81)$$

así, combinando (2.80) y (2.81) se obtiene:

$$\left(\frac{1}{2}\right)^2 T_2 T_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}. \quad (2.82)$$

Repetiendo ese patrón para N número de medios ($N - 1$ interfaces), las amplitudes de las ondas que entran al sistema se relacionan con las amplitudes de salida mediante

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2}\right)^N \prod_{m=1}^{N-1} (T_m) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{1,1} & t_{1,2} \\ t_{2,1} & t_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (2.83)$$

La ecuación (2.83) es conocida como la Matriz de Transmitancia. Esta matriz en conjunto con consideraciones físicas permite obtener información importante sobre el sistema que se esté estudiando. Es importante tener en cuenta que este método se limita a estudiar sistemas constituidos por materiales estratificados separados por interfaces idealmente planas y paralelas entre sí.

2.5.1. Modos propios del sistema

Para calcular los modos propios del sistema, se considera el caso donde no hay luz incidente por el sustrato y tampoco por el superestrato, esto es, $A_1 = B_N = 0$,

$$\begin{pmatrix} A_N \\ 0 \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2}\right)^N \begin{pmatrix} t_{1,1} & t_{1,2} \\ t_{2,1} & t_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ B_1 \end{pmatrix},$$

esto da como resultado:

$$t_{2,2} = 0. \quad (2.84)$$

La ecuación (2.84) es de suma importancia, ya que al resolverse se obtiene la relación de dispersión del sistema. En secciones previas se describió cómo encontrar la relación de dispersión mediante la evaluación de la continuidad del campo electromagnético en un sistema de dos y tres capas. La ecuación (2.84) ofrece una manera práctica de obtener la relación de dispersión para un sistema de N capas.

2.5.2. Reflectancia

El método de la matriz de transmitancia también es útil para calcular la reflectancia para un sistema que sea iluminado desde el sustrato. Se busca encontrar el coeficiente de reflexión del campo electromagnético, para esto se considera que el sistema es iluminado únicamente desde el sustrato con una amplitud normalizada a 1, es decir, $B_N = 0$ y $A_1 = 1$. Se define $B_1 = r$ y $A_N = t$.

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{1,1} & t_{1,2} \\ t_{2,1} & t_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

Resolviendo (2.85) se calcula el coeficiente de reflexión r ,

$$r = -\frac{t_{2,1}}{t_{2,2}}. \quad (2.86)$$

Con esta información, se calcula la reflectancia del sistema.

$$R = |r|^2 = \left| -\frac{t_{2,1}}{t_{2,2}} \right|^2. \quad (2.87)$$

2.6. Plasmones de superficie

Los fenómenos físicos que conciernen a la nanoplasmónica se observan en la interacción de la luz visible con nanomateriales que posean portadores libres de carga (conductores). La implementación de modelos como el de Drude o Drude-Lorentz para la respuesta dieléctrica de los metales son esenciales para describir esta interacción.

Bajo ciertas condiciones físicas, esta interacción puede dar lugar a resonancias plasmónicas, donde un plasmón es la cuantización del plasma. Se pueden observar dos tipos de resonancias plasmónicas: plasmones polaritones de superficie y plasmones localizados de superficie.

2.6.1. Plasmones polaritones de superficie

Los plasmones polaritones de superficie (PPS) son ondas de densidad de carga propagativas confinadas en una interfaz metal-dieléctrico, estas son excitadas a partir del emparejamiento del vector de onda del campo electromagnético incidente con el vector de onda de la onda superficial bajo condiciones de iluminación específicas (frecuencia, polarización, vector de onda angular). Se encuentran confinadas a la interfaz y decaen exponencialmente conforme se alejan de esta.

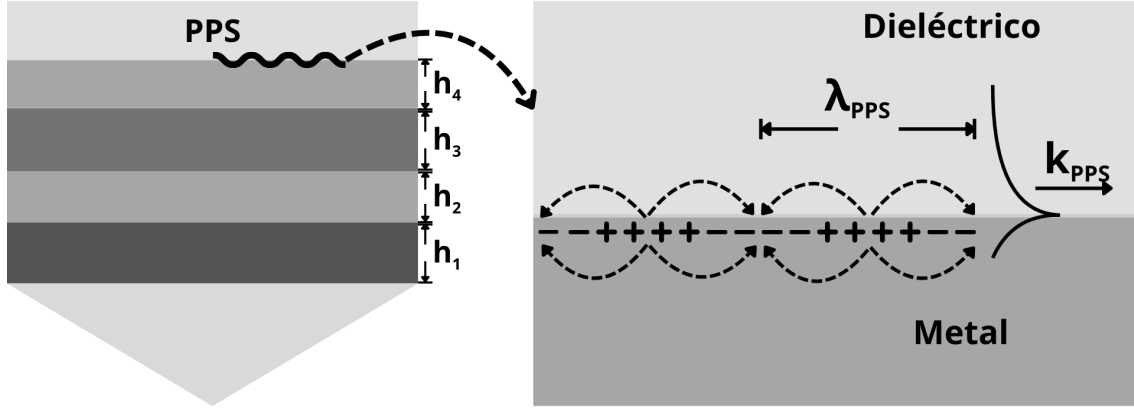


Figura 2.10: Ejemplo de sistema multicapa. En un sistema multicapa se soporta la propagación de plasmones polaritones de superficie. Los espesores h_i , $i = 1, 2, 3, 4$ tienen dimensiones de unidades o decenas de nanómetros, donde cada capa puede tener una respuesta dieléctrica diferente, que suele ser de valores reales para dieléctricos y de valores complejos para materiales conductores. Los plasmones polaritones de superficie corresponden a los modos propios del sistema multicapa.

2.6.1.1. Plasmones polaritones de superficie en una sola interfaz

Para excitar PPS es necesario al menos un metal y un dieléctrico, es decir, el sistema más simple donde se pueden excitar es en un sistema de dos capas con una sola interfaz metal-dieléctrico. Una condición necesaria para la excitación de PPS es la iluminación del sistema con luz con polarización TM, por lo cual se utiliza la relación de dispersión descrita por la ecuación (2.69), de donde se despeja β para obtener:

$$\beta = \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}}, \quad (2.88)$$

donde ε_1 es la respuesta dieléctrica del conductor (se admiten valores complejos) y ε_2 es la constante dieléctrica del medio dieléctrico.

Se grafica la relación de dispersión del modo TM, describiendo la respuesta dieléctrica del conductor con el modelo de Drude y normalizando los valores de ω y βc , a la frecuencia de plasma, véase Figura (2.11). Normalizar los valores permite comparar con mayor facilidad la frecuencia de la luz incidente con ω_p , ya que para frecuencias tales que $\omega < \omega_p$, la luz se absorbe dentro de los metales. Se observan tres líneas: una recta, que se conoce como la línea de luz del dieléctrico, y describe el comportamiento que seguiría la luz si se propagase a través de un medio dieléctrico con ε constante. A la izquierda, a valores mayores a 1, se encuentran el régimen de transparencia, una curva que describe la radiación dentro de los metales, en dicha zona, los metales se comportan de manera similar a un dieléctrico.

A la derecha de la línea de luz se encuentra la curva de dispersión que describe las excitaciones de PPS, tiene una asíntota en el valor de la frecuencia de plasmón de superficie ω_{sp} , cuyo valor define el límite de frecuencia máxima a la cual se pueden excitar PPS. Para excitarlos, es necesario empatar el vector de onda de la luz incidente con el descrito por la curva de dispersión. Como se observa en la gráfica, la línea de luz y la curva de dispersión no se intersectan, esto quiere decir que no es posible excitar PPS mediante iluminación directa. Es necesario usar técnicas especiales, por ejemplo, usando el método de Kretschmann [3].

La frecuencia de plasma del plasmón de superficie para el modelo de Drude puede ser calculada al considerar valores muy grandes para β , dando como resultado:

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \varepsilon_2}} \quad (2.89)$$

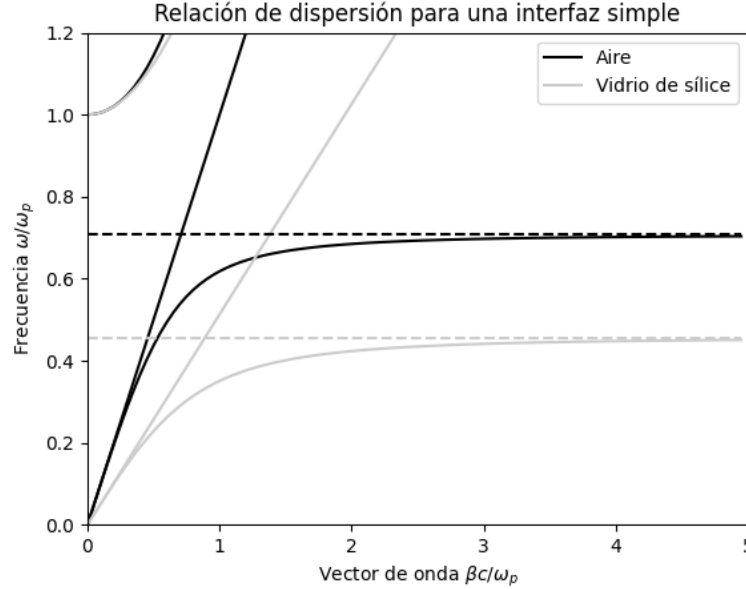


Figura 2.11: Relación de dispersión de un sistema de dos capas con interfaz ideal plana. Se presentan dos sistemas: Aire-Metal y Sílice-Metal.

Si se sigue un proceso análogo para buscar la relación de dispersión del modo TE, se obtendrá que las amplitudes de las ecuaciones (2.66) y (2.67) son iguales a cero, es decir, no es posible excitar PPS con la polarización TE.

Si se estudia un sistema de dos o más interfaces constituida de metales y dieléctricos alternados, se tendrá una ecuación trascendental compleja y no tiene soluciones analíticas, por ende, es necesario recurrir a aproximaciones algebraicas en la ecuación, o bien, implementar métodos numéricos para su solución.

Si se obtiene β compleja, a partir de la parte imaginaria, $\text{Im}[\beta]$ es posible calcular la longitud de propagación L de los modos, y está dada por:

$$L = \frac{1}{2 \text{Im}[\beta]}. \quad (2.90)$$

2.6.1.2. Reflexión Totalmente Atenuada

La técnica de reflexión totalmente atenuada (ATR por sus siglas en inglés) es una técnica experimental que permite excitar plasmones polaritones de superficie en la interfaz entre un metal y un dieléctrico. Se basa en el fenómeno de reflexión total interna, mediante el cual se generan ondas evanescentes para emparejar el vector de onda de la luz incidente al vector de onda de la resonancia plasmónica.

Esta técnica permite controlar el vector de onda angular de la luz incidente (longitud de onda, polarización y ángulo de incidencia) a fin de lograr el acoplamiento del momento necesario. Para ello, se utiliza un prisma de alto índice de refracción (usualmente vidrio) sobre el cual se coloca la muestra con los sistemas metafotónicos multicapa. Cuando el ángulo de incidencia de la luz es mayor al ángulo crítico, la transmitancia hacia el superestrato (aire) es nula y se esperaría una reflectancia total de la muestra. Sin embargo, debido a la absorción resonante causada por la excitación de modos plasmónicos, la reflectancia muestra un mínimo a un ángulo específico, correspondiente al vector de onda angular necesario para acoplar con la resonancia plasmónica. Es

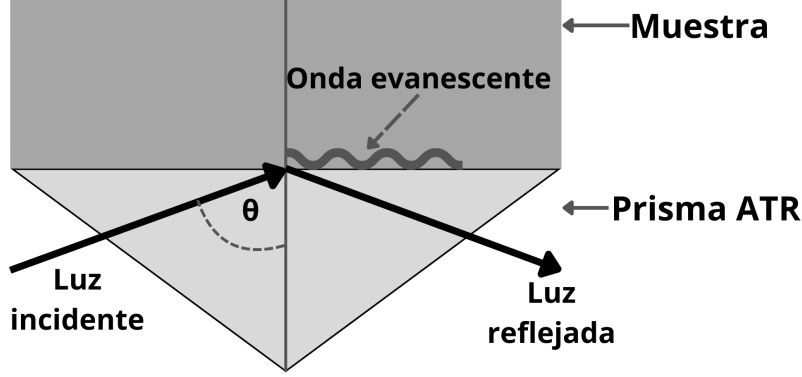


Figura 2.12: Onda evanescente generada debido a la reflexión total interna

decir, la reflexión por encima del ángulo crítico se ve atenuada como consecuencia de la excitación de un modo plasmónico del sistema multicapa.

Esta técnica considera que el índice de refracción de la muestra puede ser complejo. La parte imaginaria del índice de refracción se relaciona con la absorción de campos electromagnéticos dentro de los materiales. Es posible calcular la intensidad absorbida, absorbancia, como función del ángulo de incidencia mediante:

$$A(\theta) = \int_0^\infty \alpha(z) e^{-\frac{z}{d_p}} dz \quad (2.91)$$

donde z es la profundidad dentro de la muestra y $\alpha(z)$ es el coeficiente de absorción de la muestra en función de la profundidad.

2.6.2. Plasmones localizados de superficie

En una nanopartícula metálica, a diferencia de la propagación de PPS en una interfaz plana, las fronteras geométricas pueden sostener una oscilación localizada de la densidad de carga superficial. Esta excitación estacionaria es conocida como Plasmón Localizado de superficie (PLS). Estos modos surgen de manera natural al estudiar el esparcimiento de esferas metálicas pequeñas, de unas cuantas unidades o decenas de nanómetros, expuestas a campos electromagnéticos oscilantes externos, así, para excitar PLS no es necesario iluminar bajo condiciones específicas sobre la polarización de la luz, pues únicamente dependen de la frecuencia del campo electromagnético externo.

2.6.2.1. Características

La respuesta óptica de los PLS puede ser descrita a partir de la polarizabilidad de la partícula, la cual relaciona el campo eléctrico incidente con el momento dipolar eléctrico $\vec{p} = \alpha \vec{E}_i$. La resonancia de PLS se asocia con un polo de la polarizabilidad α de la partícula nanometálica como función de la frecuencia (longitud de onda). Esta cantidad en los metales depende de la función dieléctrica $\varepsilon(\omega)$, y por ende, depende de la frecuencia de la luz incidente y de la respuesta dieléctrica del medio circundante, asimismo, depende de la geometría de la partícula. Para nanopartículas hechas de metales nobles como el oro y la plata, las resonancias de PLS son observadas en el rango visible del espectro electromagnético.

La geometría de la partícula permite el acoplamiento de luz externa, además, provee un medio para sintonizar la energía de las excitaciones plasmónicas y localizar y aumentar campos ópticos en la vecindad de las nanopartículas [19].

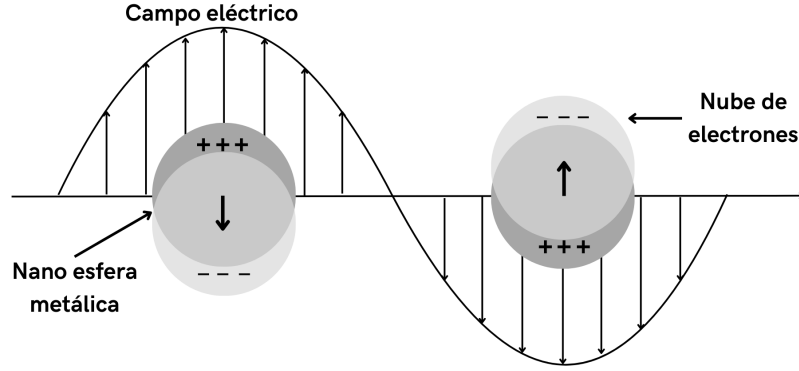


Figura 2.13: Plasmones localizados en nanoesferas metálicas.

Este método se puede implementar numéricamente usando el método de la matriz de Transmitancia, pues permite calcular la Reflectancia. Evaluando directamente la matriz (2.85) en un dominio de dos variables, por ejemplo, longitud de onda λ y ángulo de incidencia θ_{inc} , es posible obtener un mapa de reflectancia con la información del sistema, del cual se puede saber a cuál longitud de onda y ángulo de incidencia se excita una resonancia plasmónica en un sistema dado.

2.6.3. Teoría de Mie

Esta sección contiene una síntesis de la teoría necesaria para entender la Teoría de Mie. Dicha teoría es extraída de [15].

2.6.3.1. Absorción y esparcimiento por una esfera

Dado que se considera la interacción del campo electromagnético con esferas, se requiere resolver la ecuación escalar de onda en coordenadas esféricas,

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + k^2 \psi = 0, \quad (2.92)$$

donde se propone una función que sea el producto de tres soluciones particulares de la siguiente forma,

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (2.93)$$

que sustituida en (2.92) da lugar a tres ecuaciones diferenciales. La primera es:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m^2 \Phi = 0, \quad (2.94)$$

cuyas soluciones son:

$$\Phi_e = \cos m\phi, \Phi_o = \sin m\phi. \quad (2.95)$$

La segunda ecuación diferencial es:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0, \quad (2.96)$$

cuyas soluciones son los Polinomios Asociados de Legendre,

$$\Theta(\theta) = P_n^m(\cos \theta). \quad (2.97)$$

Por último, se obtiene la ecuación:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + [k^2 r^2 - n(n+1)] R = 0, \quad (2.98)$$

que mediante el cambio de variable

$$\rho = kr,$$

y definiendo la función

$$Z = R\sqrt{\rho},$$

se obtienen las funciones de Bessel de primer orden

$$j_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{n+1/2}(\rho), \quad (2.99)$$

las funciones de Neumann (Bessel de segundo orden)

$$n_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} N_{n+1/2}(\rho), \quad (2.100)$$

y las funciones de Hankel (Bessel de tercer orden)

$$h_n^{(1)}(\rho) = j_n(\rho) + in_n(\rho), \quad (2.101)$$

y

$$h_n^{(2)}(\rho) = j_n(\rho) - in_n(\rho). \quad (2.102)$$

Retomando (2.93), las soluciones que se pueden construir son

$$\psi_{emn} = \cos m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(kr), \quad (2.103)$$

y

$$\psi_{omn} = \sin m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(kr), \quad (2.104)$$

donde los subíndices o y e indican que se trata de una función par e impar, respectivamente. $z_n(kr)$ es cualquiera de las funciones de Bessel listadas.

2.6.3.2. Esféricos armónicos vectoriales

Se requiere conocer el esparcimiento de una onda plana polarizada (por conveniencia) en la dirección x debido a una esfera arbitraria. Dicha onda plana puede describirse mediante:

$$\vec{E}_i = E_0 e^{ikr \cos \theta} \hat{e}_x, \quad (2.105)$$

con

$$\hat{e}_x = \sin \theta \cos \phi \hat{e}_r + \cos \theta \cos \phi \hat{e}_\theta - \sin \phi \hat{e}_\phi. \quad (2.106)$$

La expresión para la onda plana incidente (2.105) se puede expandir en esféricos armónicos vectoriales:

$$\vec{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} \left(B_{emn} \vec{M}_{emn} + B_{omn} \vec{M}_{omn} + A_{emn} \vec{N}_{emn} + A_{omn} \vec{N}_{omn} \right), \quad (2.107)$$

Para este análisis, se requiere de los esféricos vectoriales generados por ψ_{+mn} y ψ_{-mn} , que están dados por:

$$\begin{aligned}\vec{M}_{emn} &= \nabla \times (\vec{r}\psi_{emn}), & \vec{M}_{omn} &= \nabla \times (\vec{r}\psi_{omn}), \\ \vec{N}_{emn} &= \frac{\nabla \times \vec{M}_{emn}}{k}, & \vec{N}_{omn} &= \frac{\nabla \times \vec{M}_{omn}}{k}.\end{aligned}$$

Se puede demostrar que cada uno de los esféricos armónicos generados por ψ_{emn} y ψ_{omn} son ortogonales entre sí, así, los coeficientes de la expansión en (2.107) pueden ser encontrados a partir de:

$$B_{emn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{E}_i \cdot \vec{M}_{emn} \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\vec{M}_{emn}|^2 \sin \theta d\theta d\phi}, \quad (2.108)$$

con expresiones similares para B_{omn} , A_{emn} y A_{omn} . Debido a las condiciones de ortogonalidad, la expansión de esféricos armónicos es reducida a:

$$\vec{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty} \left(B_{o1n} \vec{M}_{o1n}^{(1)} + A_{e1n} \vec{N}_{e1n}^{(1)} \right), \quad (2.109)$$

que al determinar los coeficientes B_{o1n} y A_{e1n} se obtiene:

$$\vec{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\vec{M}_{o1n}^{(1)} - i \vec{N}_{e1n}^{(1)} \right), \quad (2.110)$$

donde se añade el superíndice ⁽¹⁾ a los armónicos esféricos vectoriales para los que la dependencia radial de las funciones generadoras está especificada por j_n .

Aplicando el rotacional a (2.110) se obtiene:

$$\vec{H}_i = \frac{-k}{\omega\mu} E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\vec{M}_{e1n}^{(1)} + i \vec{N}_{o1n}^{(1)} \right). \quad (2.111)$$

Para las condiciones de frontera para el campo incidente, esparcido e interno de la esfera se establece que:

$$\left(\vec{E}_i + \vec{E}_s - \vec{E}_1 \right) \times \hat{e}_r = \left(\vec{H}_i + \vec{H}_s - \vec{H}_1 \right) \times \hat{e}_r = 0. \quad (2.112)$$

La expansión correspondiente para el campo interno es

$$\begin{aligned}\vec{E}_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(c_n \vec{M}_{o1n}^{(1)} - i d_n \vec{N}_{e1n}^{(1)} \right), \\ \vec{H}_1 &= \frac{-k_1}{\omega\mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(d_n \vec{M}_{e1n}^{(1)} + i c_n \vec{N}_{o1n}^{(1)} \right)\end{aligned} \quad (2.113)$$

mientras que para el campo esparcido es

$$\begin{aligned}\vec{E}_s &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i a_n \vec{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \vec{M}_{o1n}^{(3)} \right), \\ \vec{H}_s &= \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i b_n \vec{N}_{o1n}^{(3)} + a_n \vec{M}_{e1n}^{(3)} \right),\end{aligned} \quad (2.114)$$

donde se añade el superíndice ⁽³⁾ a los armónicos esféricos vectoriales para los cuales la dependencia radial de las funciones generadoras está especificada por h_n .

De (2.112) se obtienen cuatro condiciones de frontera en forma de componentes del campo electromagnético.

$$\begin{aligned} E_{i\theta} + E_{s\theta} &= E_{1\theta}, & E_{i\phi} + E_{s\phi} &= E_{1\phi}, \\ H_{i\phi} + H_{s\phi} &= H_{1\phi}, & H_{i\theta} + H_{s\theta} &= H_{1\theta}, \end{aligned} \quad (2.115)$$

donde $r = a$. Desarrollando, se obtienen cuatro ecuaciones acopladas, que al resolver se obtienen los coeficientes c_n, d_n ,

$$b_n = \frac{\psi_n(mx)\psi'_n(x) - m\psi_n(x)\psi'_n(mx)}{\psi_n(mx)\xi'_n(x) - m\xi_n(x)\psi'_n(mx)} \quad (2.116)$$

y

$$a_n = \frac{m\psi_n(mx)\psi'_n(x) - \psi_n(x)\psi'_n(mx)}{m\psi_n(mx)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\psi'_n(mx)}, \quad (2.117)$$

donde son usadas las relaciones

$$x = ka = \frac{2\pi Na}{\lambda}, \quad k_1 = \frac{N_1}{N}.$$

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

Con los coeficientes a_n y b_n es posible calcular la sección transversal de esparcimiento

$$C_{\text{sca}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left(|a_n|^2 + |b_n|^2 \right), \quad (2.118)$$

y de extinción

$$C_{\text{ext}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re} \{a_n + b_n\}. \quad (2.119)$$

2.6.4. Medición de PLS

Experimental y numéricamente, se puede medir la frecuencia a la cual se excitan los PLS mediante la medición de la sección transversal del esparcimiento y absorción de la partícula, que físicamente relacionan la energía que es reflejada a campo lejano y la energía que es disipada dentro de la partícula, respectivamente.

Estas cantidades ya fueron definidas en la sección (2.6.3.2) con las ecuaciones (2.118) y (2.119). Físicamente, la resonancia plasmónica será óptima cuando la absorbancia medida sea máxima. Se introduce otra cantidad, la sección transversal de absorbancia, definida mediante

$$C_{\text{abs}} = C_{\text{ext}} - C_{\text{sca}} \quad (2.120)$$

y tal como su nombre sugiere, indica la cantidad de energía incidente en la partícula que es absorbida.

2.7. Técnica de Integración Finita

La técnica de integración finita, propuesta por Weiland [20], se basa en la discretización de las ecuaciones de Maxwell en su forma integral. Este conjunto de ecuaciones discretizadas funcionan muy bien para simulación numérica, y puede ser usada para una amplia gama de simulaciones para fenómenos físicos que involucren ondas acústicas, electromagnéticas y elastodinámicas [21]; asimismo son esenciales para teoría de campo electromagnético discreto [22]. Esta técnica también es útil para el modelado de metamateriales [23].

Si se quiere simular la interacción del campo electromagnético con materiales, se puede discretizar el espacio en un dominio de cómputo, para pasar de un material continuo a un material

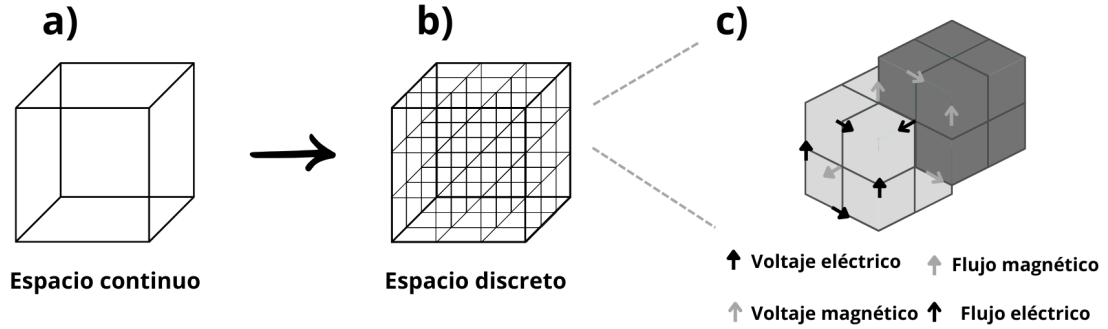


Figura 2.14: a) Representación de algún medio físico, medio continuo. b) Medio físico discreto. c) Propagación del campo electromagnético a través del mallado.

discretizado en elementos finitos. El mallado que se puede visualizar es un mallado primario, y cada uno tiene internamente un mallado secundario que es ortogonal al primero.

En el mallado principal el voltaje eléctrico circula por las aristas del mallado y el flujo magnético atraviesa las caras del paralelepípedo. Por su parte, en el mallado secundario circula voltaje magnético y el flujo eléctrico atraviesa las caras del paralelepípedo. Asignando condiciones iniciales en alguna de las caras del espacio discreto, es posible resolver las ecuaciones de Maxwell discretas a lo largo de todo el sistema.

2.8. Aproximación por el método de expansión polar de Breit-Weigner

Esta sección se desarrolla con base en las referencias [24–26].

El determinante del sistema de ecuaciones obtenido a partir del método de la matriz de transmitancia es una función compleja dada por

$$D(k, \omega), \quad (2.121)$$

donde k es un número real y ω es un número complejo. Para obtener los valores propios (modos) del sistema, el determinante se iguala a cero.

Para encontrar la parte real e imaginaria de los ceros de esta función se emplea la aproximación de polos simples para obtener una función Lorentziana que siga la fórmula de Breit-Wiegnier. Para ello, se analiza la naturaleza de la función: para lo cual se supone que $D(k, \omega)$ es una función holomorfa (analítica) de ω para un valor fijo de k . Es decir, es una función diferenciable para un valor de k ; también se supone que $\omega_0(k) = \omega_R(k) + i\omega_I(k)$ es un polo simple (cero simple) de $D(k, \omega_0)$ para k fijo. Esto significa que

$$D(k, \omega_0(k)) = 0, \quad (2.122)$$

y

$$\left. \frac{\partial D}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0(k)} \neq 0 \quad (2.123)$$

Se expande $D(k, \omega(k))$ en serie de Taylor alrededor del punto $\omega_0(k)$, donde se tiene:

$$D(k, \omega) = D(k, \omega_0) + (\omega - \omega_0) \frac{\partial D(k, \omega_0)}{\partial \omega} + \dots \quad (2.124)$$

Suponiendo que $D(k, \omega) = 0$ es un cero simple, los términos de orden superior son pequeños cerca de cero, y se escribe

$$D(k, \omega) \approx (\omega - \omega_0) \frac{\partial D(k, \omega_0)}{\partial \omega} \quad (2.125)$$

Como la función es holomorfa, se hace $A = \partial D(k, \omega_0) / \partial \omega$, que es un número complejo diferente de cero, y como $\omega_0(k) = \omega_R(k) + i\omega_I(k)$ se tiene

$$D(k, \omega) \approx A [\omega - \omega_R(k) - i\omega_I(k)]. \quad (2.126)$$

Entonces, si $D(k, \omega)$ es un cero simple del determinante, esta aproximación es válida cerca del cero.

De aquí,

$$\frac{1}{D(k, \omega)} = \frac{1}{A [\omega - \omega_R(k) - i\omega_I(k)]}. \quad (2.127)$$

Se calcula el módulo cuadrado del inverso del determinante para obtener

$$\left| \frac{1}{D(k, \omega)} \right|^2 = \left| \frac{1}{A [\omega - \omega_R(k) - i\omega_I(k)]} \right|^2 = \frac{1}{|A|^2} \cdot \frac{1}{|\omega - \omega_R(k) - i\omega_I(k)|^2}. \quad (2.128)$$

Si $z = -\omega_R(k) - i\omega_I(k)$, entonces $|z|^2 = (\omega - \omega_R(k))^2 + \omega_I^2(k)$, con lo que

$$\left| \frac{1}{D(k, \omega)} \right|^2 = \frac{1}{|A|^2} \cdot \frac{1}{(\omega - \omega_R(k))^2 + \omega_I^2(k)} \quad (2.129)$$

Esta ecuación tiene la forma de una función Lorentziana centrada en $\omega_R(k)$ con ancho a la mitad del máximo $2\omega_I(k)$:

$$L(\omega) = \frac{1}{(\omega - \omega_R(k))^2 + \Gamma^2}. \quad (2.130)$$

Es decir, el pico de esta función ocurre en $\omega = \omega_R(k)$:

$$f(\omega_R) = \frac{1}{\omega_I^2(k)},$$

cuyo ancho está determinado por la tasa de decaimiento $\omega_I(k)$, es decir

$$f(\omega) = \frac{1}{2} f(\omega_R(k)) = \frac{1}{2\omega_I^2(k)}.$$

Resolviendo para ω tal que

$$\frac{1}{(\omega - \omega_R(k))^2 + \omega_I^2(k)} = \frac{1}{2\omega_I^2(k)},$$

se tiene que

$$\begin{aligned} 2\omega_I^2(k) &= (\omega - \omega_R(k))^2 + \omega_I^2(k), \\ 2\omega_I^2(k) - \omega_I^2(k) &= (\omega - \omega_R(k))^2, \\ \omega_I^2(k) &= (\omega - \omega_R(k))^2. \end{aligned}$$

Entonces, los valores de ω a la mitad del máximo son

$$\omega = \omega_R(k) \pm \omega_I(k).$$

De esta manera, al ancho a la mitad del máximo (FWHM) es

$$\text{FWHM} = 2\omega_I(k)$$

Por lo tanto, una aproximación válida para estimar el valor de la parte real e imaginaria del determinante es proceder como sigue:

1. A partir del método de la matriz de transmitancia, obtener el determinante de la matriz total.
2. Obtener el módulo cuadrado del determinante.
3. Invertir el determinante.
4. Evaluar el inverso del módulo cuadrado del determinante en un dominio real del índice efectivo ($\text{Re}[n_{ef}]$) para cada valor de λ .
5. Para cada λ , buscar los valores para los cuales $\text{Re}[n_{ef}]$ hace máxima la función (máximos locales). Cada uno de estos valores corresponde a la parte real del índice efectivo de cada modo.
6. Para cada máximo local (n_{ef}), calcular el ancho a la mitad del máximo (FWHM).
7. Dividir este valor a la mitad, el cual corresponde a la parte imaginaria del índice efectivo del modo respectivo.

Capítulo 3

Solución numérica de la relación de dispersión de sistemas metafotónicos multicapa

En este capítulo se comparan algunos modelos dispersivos para el oro. Posteriormente se describe un método para calcular la frecuencia de corte para el modelo de Drude-Lorentz y datos experimentales. Esta frecuencia de corte es análoga a la frecuencia de plasmón de superficie ω_{sp} descrita en el modelo de Drude para los metales. Después, se describe un método numérico para resolver ecuaciones trascendentales complejas, esto con el fin de resolver la relación de dispersión de diferentes sistemas metafotónicos multicapa y encontrar los modos plasmónicos soportados. Se valida dicho método numérico con ecuaciones bien conocidas de la literatura [5] y con otro método numérico basado en aproximaciones [27, 28].

3.1. Comparación de modelos dispersivos para el oro

Como ya se mencionó en el Capítulo 2, a lo largo de los años se han propuestos algunos modelos para describir la función dieléctrica de los metales, específicamente, del oro. También se han reportado diferentes datos experimentales de la medición de la respuesta dieléctrica del oro bajo diferentes condiciones [17, 18, 29]. Estos datos experimentales pueden ser empleados para realizar cálculos numéricos y simulaciones, para los cuales se hace una interpolación de datos experimentales para así analizar la interacción de la luz con la materia en longitudes de onda específicas que no estén consideradas originalmente en dichos conjuntos de datos.

En la Figura (3.1) se muestra la función dieléctrica del modelo de Drude-Lorentz y 4 conjuntos de datos experimentales para el oro. En la parte real de ϵ el modelo de Drude-Lorentz presenta un mínimo local ubicado aproximadamente en 450 nm, que difiere bastante del conjunto de datos experimentales. El resto de curvas siguen un comportamiento similar, salvo por la curva interpolada de los datos de Johnson y Christy, que tiene dos cambios abruptos de valores, primero presentando una pendiente entre los 550 y 650 nm, aproximadamente, para después presentar una pendiente con mayor inclinación que poco a poco se acerca a las demás curvas conforme aumenta la longitud de onda. Respecto a las demás curvas, la curva correspondiente a los datos de Palik se diferencia de las curvas de Yakubovsky para 25 y 53 nm; este último par presenta consistencia en sus valores y no se observan cambios significativos en sus gráficas.

En lo que respecta a la parte imaginaria, el modelo de Drude-Lorentz presenta un máximo local aproximadamente en 450 (justo donde presenta un mínimo local en la parte real) que difiere del resto de los datos. Por otra parte, las curvas de los datos de Palik y Johnson y Christy no son suaves en

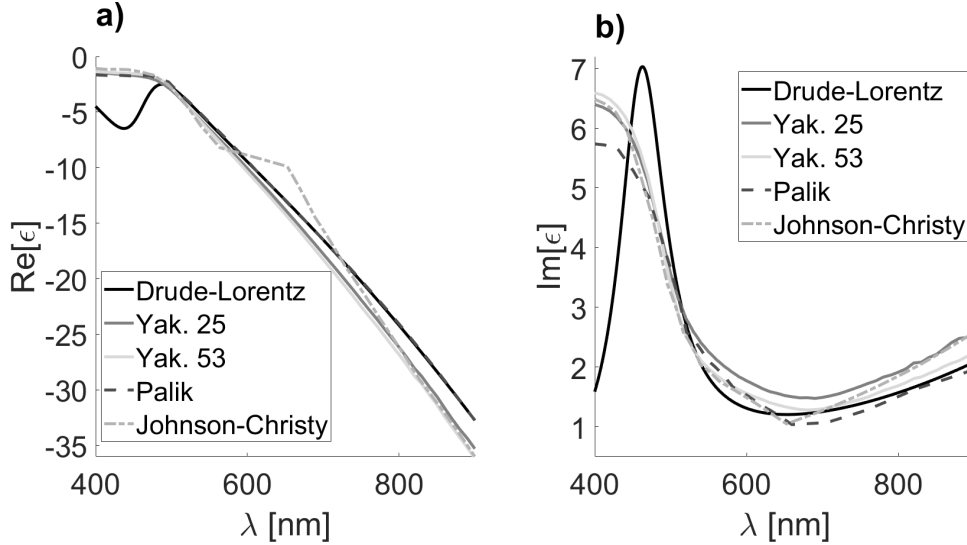


Figura 3.1: Gráfica de función dieléctrica para el oro en cinco diferentes modelos. a) Parte real de ϵ . b) Parte imaginaria de ϵ .

ciertos puntos, presentando pendientes bien marcadas y con cambios de inclinación notorios entre sí. Los valores correspondientes a los datos de Yakubovsky presentan un comportamiento similar y no poseen cambios abruptos en sus curvas.

Con este breve análisis, se establece que a lo largo del presente capítulo se usará el modelo de Drude-Lorentz y los datos de Yakubovsky para describir las capas de oro en los sistemas multicapa propuestos. Para tener consistencia con los valores que muestran, 25 y 53 nm, estos datos serán usados para cuando se consideren capas de 20 y 50 nm, respectivamente.

3.2. Determinación de la frecuencia de corte para PPS

Como se mencionó anteriormente, los PPS sólo pueden ser acoplados bajo ciertas condiciones de iluminación, siendo una de esas condiciones la frecuencia de la luz incidente. Por ejemplo, si se tiene un sistema bicapa dieléctrico-metal cuya interfaz sea plana, con ambos medios semi-infinitos, con la respuesta dieléctrica del metal descrita por el modelo de Drude, los PPS no podrán generarse para frecuencias mayores a la limitada por la frecuencia de plasma del plasmón de superficie ω_{sp} . La ecuación que describe dicho modelo permite obtener dicha frecuencia de corte sin mayor complicación, sin embargo, cuando la respuesta dieléctrica del metal se describe con otro modelo, por ejemplo, Drude-Lorentz o mediante la interpolación de datos experimentales, la frecuencia de corte no puede obtenerse mediante expresiones analíticas.

La frecuencia de corte es importante, pues ayuda a delimitar el rango en el cual sí es posible excitar modos plasmónicos, numéricamente, acotar el rango de longitudes de onda que interactúa con un sistema metafotónico multicapa, permite acortar el tiempo de cómputo. Con este fin, se calcula la frecuencia de corte, denotada por λ_{csp} , específicamente, la longitud de onda de corte para la generación de resonancias plasmónicas en la interacción del oro con diferentes medios dieléctricos.

3.2.1. Frecuencia de corte y teoría de Mie

Al iluminar una nanoesfera metálica directamente con una onda plana, pueden excitarse PLS sin requerir de técnicas de iluminación especial. Se analiza la excitación de resonancias plasmónicas

localizadas en nanoesferas de oro de diferentes tamaños embebidas en diferentes medios dieléctricos. Se realizan cálculos numéricos para obtener Q_{abs} normalizada de 5 nanoesferas de diferente dimensión, 5, 10, 15, 25 y 50 nm, en un rango espectral de 400 a 900 nm.

3.2.1.1. Modelo de Drude-Lorentz

Para proponer alguna relación entre la generación de PLS y la frecuencia de corte para la generación de PPS en sistemas multicapa con interfaces planas ideales, se comienza por analizar el modelo de Drude-Lorentz, donde se compara el valor obtenido de Q_{abs} normalizada para las nanoesferas de diferente tamaño contra el mapa de dispersión obtenido para un sistema de una interfaz dieléctrico-oro. Se analiza el caso aire-oro.

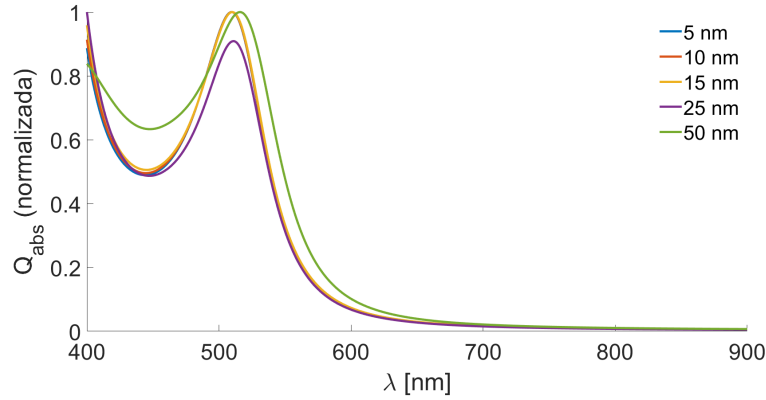


Figura 3.2: Cálculo de Q_{abs} (normalizada) para nanoesferas metálicas de oro embebidas en aire ($n = 1$) con ε_{metal} descrita por el modelo de Drude-Lorentz.

De la figura (3.2) se observa que las esferas de 5, 10 y 15 nm exhiben una respuesta muy similar entre sí. Nótese que el máximo para la esfera de 25 nm se desplaza hacia una longitud de onda ligeramente mayor. De manera similar, el máximo para la esfera de 50 nm se desplaza hacia una longitud de onda aún mayor; véase que a pesar de tener un radio 10 veces más grande que la primera esfera, apenas exhibe un ligero desplazamiento.

La aparición de estos máximos puede dar una idea de dónde se localiza la longitud de onda de corte si se compara contra el mapa de dispersión de un sistema de una interfaz aire-oro conformado por dos medios semi-infinitos.

De la figura (3.3) se observa que los mínimos (regiones oscuras) comienzan a desaparecer en algún punto ubicado entre el rango de 500 y 600 nm. Se propone definir la longitud de onda de corte en la frecuencia cuyo valor máximo de Q_{abs} correspondiente a la esfera de tamaño mínimo decaiga a $\frac{1}{e}$ para valores de λ mayores a donde se encuentra dicho máximo. Se puede elegir cualquier curva de las diferentes esferas para definir la longitud de onda de corte, pero se elige la de la esfera más pequeña, puesto que los valores de esferas de tamaño consecuente tienden al valor de la esfera de tamaño mínimo.

Se grafican los valores obtenidos, $\lambda_{csp} = 547$ nm y $\lambda_{csp} = 566$ nm sobre el mapa anterior, figura (3.3), y sobre el mapa de dispersión de un sistema aire-vidrio, respectivamente.

De la figura (3.4), en el sistema aire-oro se observan mínimos que quedan a la derecha ($\text{Re}[n] > 1$) de la línea de luz del sustrato. A su vez estos se ubican para valores tales que $\lambda > \lambda_{csp} = 547$ nm. Si bien algunos mínimos están presentes fuera de esta región, por ejemplo, aquellos ubicados para valores $\lambda < \lambda_{csp} = 547$ nm pueden interpretarse como resonancias plasmónicas que no son excitadas de manera eficiente. En el sistema vidrio-oro ocurre algo similar, pues se observan mínimos que quedan a la derecha ($\text{Re}[n] > 1.5$) de la línea de luz del sustrato, mientras que para valores a la

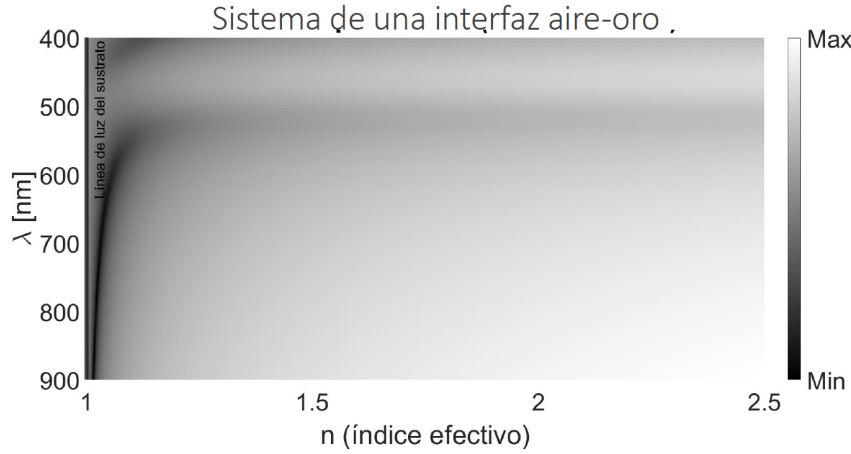


Figura 3.3: Mapa de dispersión de un sistema de una sola interfaz plana aire-Oro (Drude-Lorentz)

izquierda ($\text{Re}[n] < 1.5$) no se observan mínimos. La mayoría de mínimos encontrados se localizan para valores tales que $\lambda > \lambda_{csp} = 566$ nm, en esta región las resonancias plasmónicas acopladas pertenecen a modos en bulto. Nótese que la frecuencia de corte aumentó cuando se creció el valor del sustrato de $n=1$ a $n=1.5$. Esto es consistente con lo observado para el modelo de Drude sin pérdidas, es decir, si se aumenta el valor del índice n del sustrato, manteniendo el mismo metal, aumentará la longitud de onda que acota la región donde es posible excitar resonancias plasmónicas.

Numéricamente, acotar las regiones reduce sustancialmente el problema de resolver la relación de dispersión del sistema en vecindades cuyos valores sean parecidos entre sí, pues resolver la relación de dispersión en regiones donde los valores mínimos se extiendan por una vecindad compromete la velocidad del programa ya que es más difícil encontrar raíces aproximadas si los valores no convergen rápidamente a un punto específico del dominio del índice efectivo n .

3.2.1.2. Datos experimentales

Se propone definir la longitud de onda de corte bajo el mismo procedimiento anteriormente descrito para el modelo de Drude-Lorentz, pero para datos experimentales interpolados. Se emplean los datos previamente mencionados.

Calculando la longitud de onda de corte para una nanoesfera de oro, cuya función dieléctrica está descrita por los datos de Yak para una película metálica de 53 nm de espesor, embebida en aire se obtiene $\lambda_{csp} = 538$ nm. Si la esfera está rodeada de vidrio con índice $n=1.5$, se obtiene: $\lambda_{csp} = 559$ nm

Se generan los mapas de dispersión para dos sistemas de dos interfaces en configuración, DMD (Dieléctrico-Metal-Dieléctrico): aire-oro-aire, y vidrio-oro-aire, con la luz incidiendo desde el aire y el vidrio, respectivamente. El núcleo de oro tiene 50 nm de espesor en ambos casos y es descrito por los datos de Yak para 53 nm.

En la Figura (3.5) a) se observan dos trazos tenues de mínimos, los cuales describen a dos modos confinados diferentes. La longitud de onda mostrada es la correspondiente al caso de la interacción Aire-Oro, la cual acota los mínimos mostrados en el mapa, y delimita la región en donde estos pueden ser acoplados. En la figura Figura (3.5) b) se observan dos modos a simple vista: un modo radiado ubicado entre $n=1$ y $n=1.5$, y un modo confinado que aparece para valores mayores a $n=1.5$. Este sistema cuenta con dos interfaces diferentes, aire-oro y vidrio-oro, por ende, se compara la longitud de onda de corte para la interacción aire-oro y vidrio oro. Como se observó previamente, cambiar un material en una configuración de una interfaz, tal que este posea un índice de refracción mayor respecto del anterior material, la frecuencia de corte del sistema aumentará, fenómeno que se visualiza en este mapa, pues la frecuencia de corte para la interacción vidrio-oro

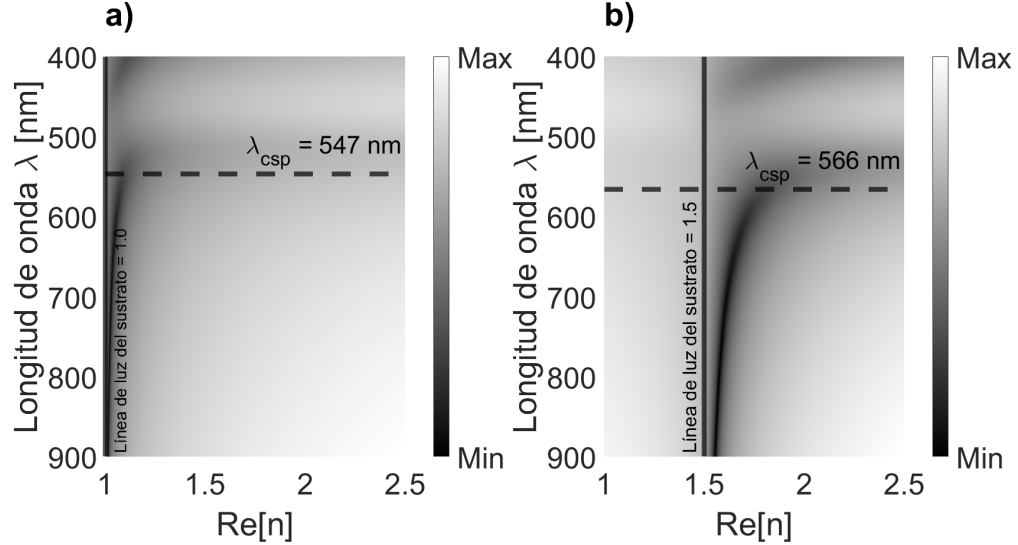


Figura 3.4: Mapas de dispersión con longitud de onda de corte calculada a partir de la teoría de Mie para la interacción de una onda plana con una nanoesfera metálica de oro con función dieléctrica dada por el modelo de Drude-Lorentz a) Sistema de una interfaz aire-oro. b) Sistema de una interfaz vidrio-oro.

es más grande que la de la interacción aire-oro; la frecuencia correspondiente a la interacción aire-oro acota gran parte de los mínimos del mapa, sin embargo, en un rango de longitudes de onda mayor a esta, los mínimos del mapa no están bien definidos y se extienden por varios valores de índice de refracción. Por otra parte, frecuencia de corte correspondiente a la interacción vidrio-metal recorta más frecuencias del mapa de dispersión, de manera que los mínimos en la región para $\lambda > \lambda_{csp, vidrio-Au}$ están más definidos.

Con las observaciones anteriores, se propone que para los sistemas metafotónicos multicapa a estudiar, sólo se realicen cálculos para longitudes de onda tales que $\lambda_{csp} > \max[\lambda_{csp,1,2,\dots,l}]$, donde l es el número frecuencias de corte del sistema, las cuales se obtienen de examinar todas las combinaciones posibles de interacción en pares dieléctrico-metal.

3.3. Caracterización de índice de refracción de un sistema multicapa

La relación de dispersión de un sistema multicapa puede ser obtenida a partir del método de la matriz de transmitancia para un sistema de n interfaces. Obtener las raíces aproximadas de la relación de dispersión permite caracterizar el índice de refracción efectivo complejo del sistema. Se sabe que dicha relación de dispersión es una ecuación trascendental compleja que contiene toda la información del sistema metafotónico que se estudia, depende de la frecuencia ω de la luz incidente y del vector de onda β correspondiente al modo soportado por el sistema.

Recordando que

$$\omega = 2\pi\nu, \quad \nu = \frac{v}{\lambda},$$

y definiendo el índice de refracción efectivo como

$$\beta = n_{ef} \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (3.1)$$

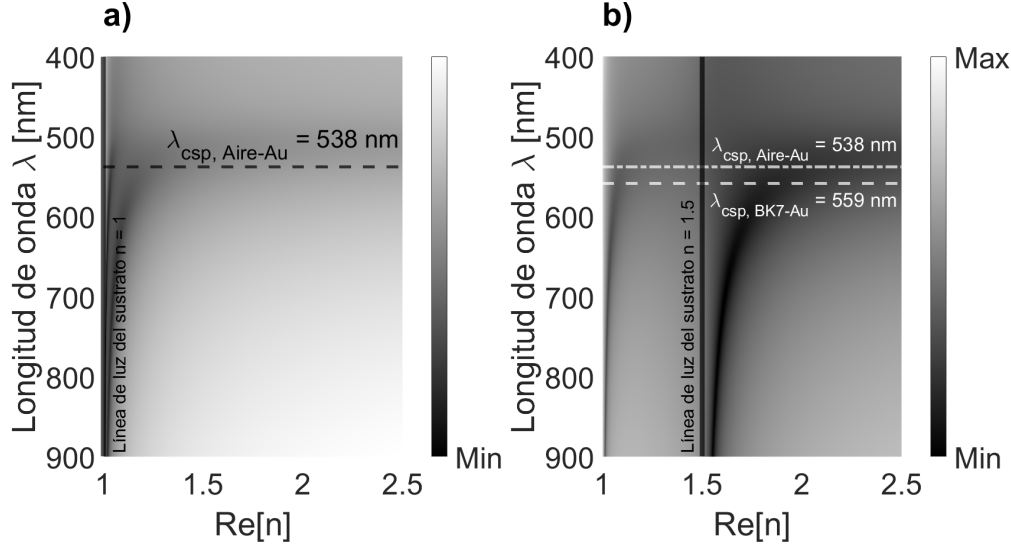


Figura 3.5: Comparación de localización de longitudes de onda de corte sobre mapas de dispersión para dos sistemas de dos interfaces. a) Sistema aire-oro-aire. b) Sistema vidrio-oro-aire.

la relación de dispersión puede ser expresada en términos de la longitud de onda λ y el índice de refracción efectivo complejo $n_{ef} = n = \eta + i\kappa$, donde η y κ son la parte real e imaginaria del índice de refracción efectivo.

3.3.0.1. Solución numérica de la relación de dispersión

Así, la relación de dispersión de un sistema multicapa tiene la forma:

$$f(\lambda, n) = 0, \quad (3.2)$$

donde $f(\lambda, n) \in \mathbb{C}$; asimismo, $\lambda \in \mathbb{R}$ y $n \in \mathbb{C}$.

La respuesta dieléctrica de los metales depende de la longitud de onda λ de la luz incidente, por lo tanto, el índice de refracción efectivo de los sistemas dependerá de la misma variable. Se caracteriza el índice de refracción efectivo de los sistemas metafotónicos multicapa de manera individual para cada longitud de onda a estudiar, es decir, al resolver la relación de dispersión, se toma como valor constante $\lambda = \lambda_{cte}$, de esta forma, la relación de dispersión sólo depende de una variable compleja, que puede ser expresada como:

$$f(\lambda, n) = f(\lambda_{cte}, n) = f(n). \quad (3.3)$$

Es bien sabido que una función de variable compleja, puede separarse en su parte real e imaginaria, usualmente definidas mediante [30]:

$$\text{Re}\{f(n)\} = u(n), \quad \text{Im}\{f(n)\} = v(n).$$

Para que la relación de dispersión sea igual a cero,

$$f(n) = u(n) + iv(n), \quad (3.4)$$

tiene que cumplirse simultáneamente

$$u(\eta, \kappa) = 0, \quad (3.5)$$

y

$$v(\eta, \kappa) = 0, \quad (3.6)$$

lo cual sugiere resolver un sistema de dos ecuaciones y dos incógnitas dado por (3.5) y (3.6), sin embargo, esto presenta un inconveniente: las ecuaciones resultantes son extensas y son ecuaciones trascendentales, lo que dificulta separarlas en parte real e imaginaria.

3.3.0.2. Solución mediante conjuntos de nivel (necesito otro nombre más llamativo, acepto sugerencias)

Para resolver este problema, se propone encontrar la solución a la relación de dispersión mediante la implementación de un método geométrico en MATLAB basado en el siguiente procedimiento:

1. Obtener la relación de dispersión de manera simbólica mediante el método de la matriz de Transmitancia.
2. Evaluar la relación de dispersión para una sola longitud de onda constante.
3. Evaluar simultáneamente a $f(\eta, \kappa)$ y en un dominio de dos variables D^2 . Se propone que dicho dominio esté compuesto por el producto cartesiano de dos conjuntos, $H_1 = \{\eta_{1,1}, \eta_{1,2}, \dots, \eta_{1,m}\}$ y $K_1 = \{i\kappa_{1,1}, i\kappa_{1,2}, \dots, i\kappa_{1,n}\}$, correspondientes a los valores de η y κ a evaluar. Se propone que el espaciado entre valores para cada vector sea equidistante.

Dicho dominio constará de puntos tales que $\eta_m > 1$, así se buscan soluciones donde la parte real del índice de refracción indique que la luz dentro del metamaterial viaja más lento que en el vacío y $\kappa_n > 0$, pues se buscan medios con absorción; un medio $\kappa_n < 0$ indicaría que el medio tiene ganancias.

4. Separar a $f(\eta, \kappa)$ en parte real e imaginaria.

Con este paso se obtienen dos matrices, que son las funciones $u(\eta, \kappa)$ y $v(\eta, \kappa)$. Estas matrices pueden ser representadas como funciones de dos variables en un espacio tridimensional.

5. Gráficamente, se obtienen las curvas de nivel tales que $u(\eta, \kappa) = 0$ y $v(\eta, \kappa) = 0$.
6. Se sobreponen en una sola gráfica las dos curvas de nivel, buscando la intersección de ambas curvas para obtener gráficamente los valores de η y κ que hacen $f(\eta, \kappa) = 0$.
7. Finalmente se evalúa la solución encontrada en $f(\eta, \kappa)$ para comprobar que el valor obtenido sea muy parecido a cero.

Encontrar las soluciones de la relación de dispersión mediante el sistema descrito anteriormente depende de la observación de la gráfica y de la obtención manual de los datos a simple vista. Una desventaja computacional que presenta la implementación de este método es la necesidad de subdividir el dominio D en intervalos considerablemente pequeños, lo que puede conllevar a un tiempo de computación prolongado, por lo cual se propone lo siguiente:

3.3.0.3. Algoritmo de reducción de dominio

Se mantienen los mismos pasos descritos en el método anterior hasta el paso número 4.

1. Evaluar la relación de dispersión en un dominio C_1 y separar los datos obtenidos en parte real e imaginaria, u y v . Ambos conjuntos de datos son matrices de dimensión $m \times n$, donde ningún dato está acotado. Figura (3.6).
2. Para homogeneizar los cálculos a realizar, se calcula el valor absoluto de cada elemento de las matrices de u y v . Posteriormente se normaliza cada conjunto de datos, así, cada valor está acotado de manera que $0 \leq U_{m,n} \leq 1$ y $0 \leq V_{m,n} \leq 1$, donde se define

$$U = \frac{|u|}{\max(|u|)},$$

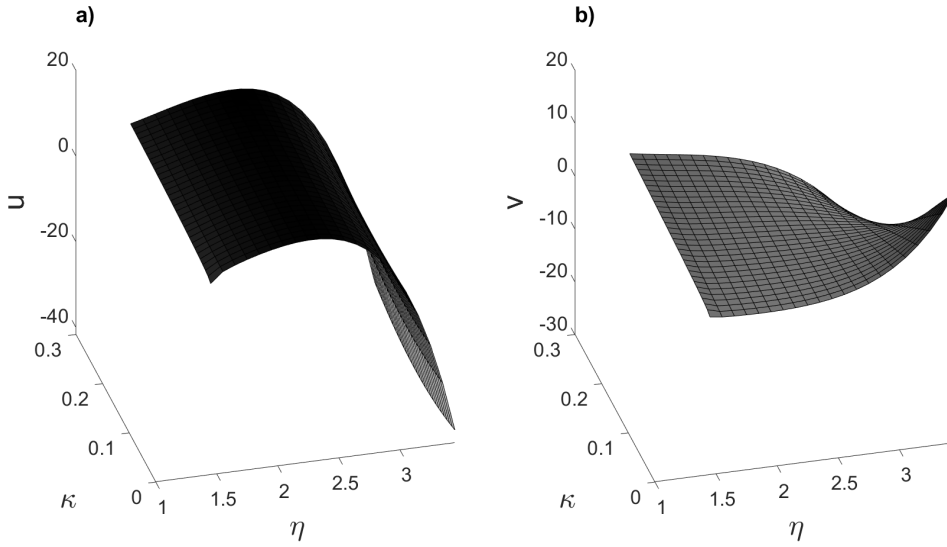


Figura 3.6: a) $\text{Re}[f(\eta, \kappa)]$ y b) $\text{Im}[f(\eta, \kappa)]$ evaluadas en un dominio C_1 . Los valores reales e imaginarios no están acotados.

y

$$V = \frac{|v|}{\max(|v|)}.$$

Véase figura Figura (3.7).

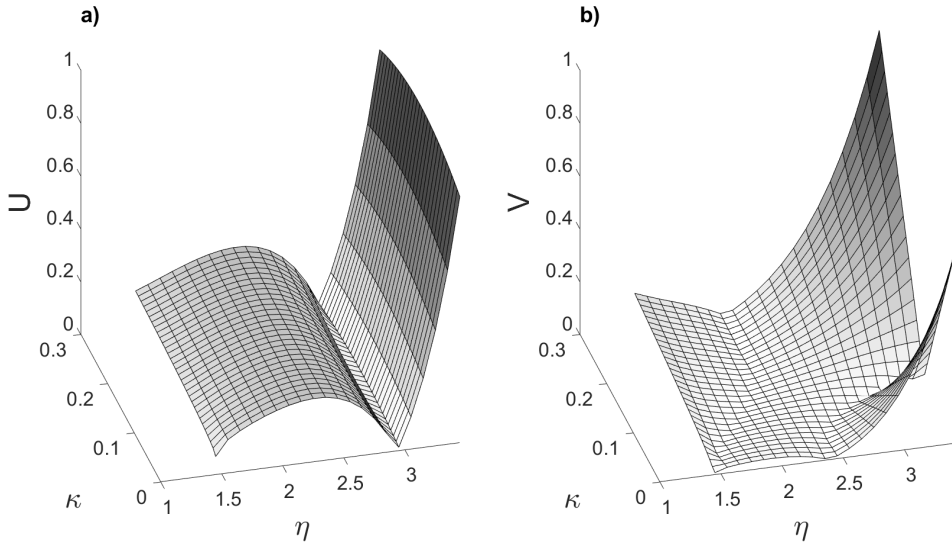


Figura 3.7: a) $\text{Re}[f(\eta, \kappa)]$ y b) $\text{Im}[f(\eta, \kappa)]$ normalizadas evaluadas en un dominio C_1 . Los valores para cada matriz están acotados entre 0 y 1.

3. Se filtran los datos obtenidos. Se busca obtener los datos con valor más cercano a cero, eliminando valores que no cumplan cierta condición de tolerancia.

Solución numérica de la relación de dispersión de sistemas metafotónicos multicapa

3.3 Caracterización de índice de refracción de un sistema multicapa

Se calculan los valores máximos $\max(U)$, $\max(V)$ y los valores mínimos $\min(U)$, $\min(V)$ de cada conjunto de datos, con los cuales se calculan los rangos de valores para cada matriz:

$$R_U = \max(U) - \min(U) \quad (3.7)$$

y

$$R_V = \max(V) - \min(V). \quad (3.8)$$

Con estos valores se configura la condición de filtrado de datos de cada matriz, las cuales se definen como

$$\Delta_r = \min(U) + R_U \delta \quad (3.9)$$

y

$$\Delta_i = \min(V) + R_V \delta, \quad (3.10)$$

donde δ es una condición de tolerancia, por ejemplo, 0.05, que corresponde a una tolerancia del 5 % de los datos con menor valor absoluto del rango de cada matriz.

Así, valores mayores que la condición de tolerancia se volverán cero, mientras que los valores que sí la cumplan conservarán su valor.

$$U_{m,n} = \begin{cases} 0, & \text{si } U_{m,n} > \Delta_r \\ U_{m,n}, & \text{si } U_{m,n} \leq \Delta_r \end{cases}$$

$$V_{m,n} = \begin{cases} 0, & \text{si } V_{m,n} > \Delta_i \\ V_{m,n}, & \text{si } V_{m,n} \leq \Delta_i \end{cases}$$

Se buscan valores que sean diferentes de cero en las matrices U y V , quedando solamente matrices con valores lógicos (0 y 1) para cada matriz. Figura (3.8).

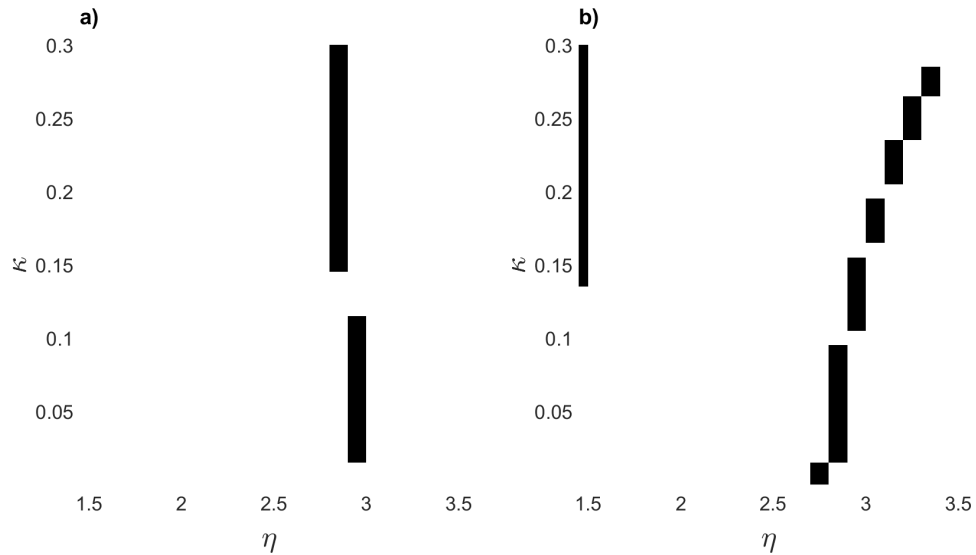


Figura 3.8: Matrices con valores lógicos después del filtrado de datos para a) $U_{m,n}$ y b) $V_{m,n}$ en C_1 .

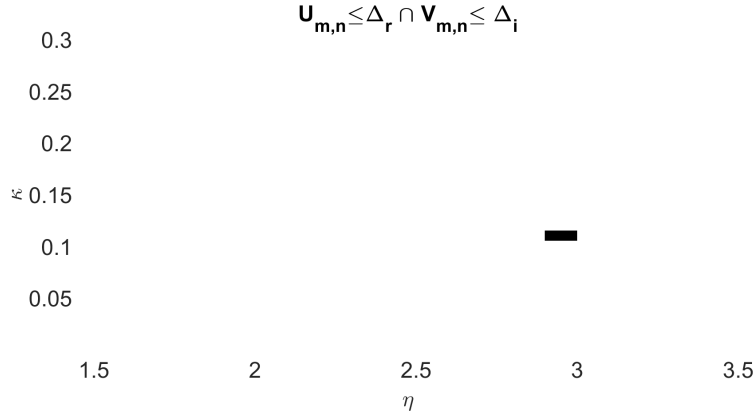


Figura 3.9: Matriz con valores lógicos que contiene los puntos tales que $f(\eta, \kappa) \approx 0$ en C_1 .

- Entonces se hace la intersección de ambas matrices, quedando una sola matriz con valores lógicos como en la figura Figura (3.9).

A partir de esta última matriz se busca el valor mínimo en los conjuntos H_{1f} y K_{1f} tal que sea diferente de cero en la matriz lógica. A la par, se busca el valor máximo en los vectores H_{1f} y K_{1f} tal que sea diferente de cero. El subíndice f indica que se trata de vectores donde se operó la condición de filtrado.

Con esto, se define un nuevo subdominio de búsqueda D_2 , compuesto por el producto cartesiano de dos subconjuntos $H_2 = \{\eta_{2,1}, \eta_{2,2}, \dots, \eta_{2,m}\}$ y $K_2 = \{\kappa_{2,1}, \kappa_{2,2}, \dots, \kappa_{2,n}\}$, correspondientes a los nuevos valores de η y κ a evaluar, donde $\eta_{2,1} = \min(H_{1f})$, $\eta_{2,m} = \max(H_{1f})$, $\kappa_{2,1} = \min(K_{1f})$ y $\kappa_{2,n} = \max(K_{1f})$.

Para estos dos subconjuntos se calcula una nueva subdivisión tal que

$$\eta_{2,m} - \eta_{2,m-1} = \frac{\eta_{1,m} - \eta_{1,m-1}}{10}$$

$$\kappa_{2,n} - \kappa_{2,n-1} = \frac{\kappa_{1,n} - \kappa_{1,n-1}}{10}$$

- Se evalúa la relación de dispersión en el nuevo dominio D_2 , y se repita la misma secuencia de pasos l número de veces. Figuras 3.10-3.13 representan la segunda iteración del método.

Cuando se obtiene la matriz lógica de la iteración l , por ejemplo, en la Figura (3.13) y en la Figura (3.14) se muestra el final de la segunda y tercera iteración, respectivamente, se evalúan los valores con valor lógico 1 en la relación de dispersión y se toma el par ordenado tal que al evaluar en la relación de dispersión, el valor absoluto sea el mínimo, el cual se tomará como el valor del índice de refracción efectivo complejo en la longitud de onda estudiada,

$$n_{ef} = \eta + i\kappa,$$

donde

$$\eta = \eta_{l,m}, \quad \kappa = \kappa_{l,n} \mid \min(|f(\eta_{l,m}, \kappa_{l,n})|).$$

Es importante recordar que las soluciones aproximadas que se obtienen tras la iteración número l corresponde sólo a una longitud de onda, por lo cual, para caracterizar el modo soportado por el sistema en un rango espectral, es necesario hacer el estudio a diferentes longitudes de onda.

El procedimiento descrito aquí ilustra de manera general cómo encontrar raíces aproximadas, y para un solo modo. Es posible que los sistemas a caracterizar soporten más de un modo plasmónico, lo cual indicaría que tienen más de un índice de refracción efectivo.

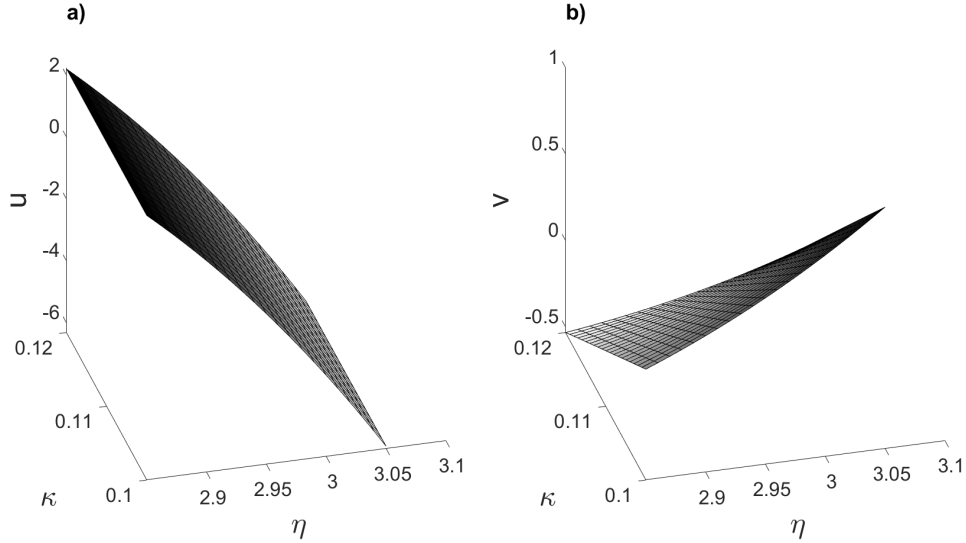


Figura 3.10: a) $\text{Re}[f(\eta, \kappa)]$ y b) $\text{Im}[f(\eta, \kappa)]$ evaluadas en un dominio D_2 . Los valores reales e imaginarios no están acotados.

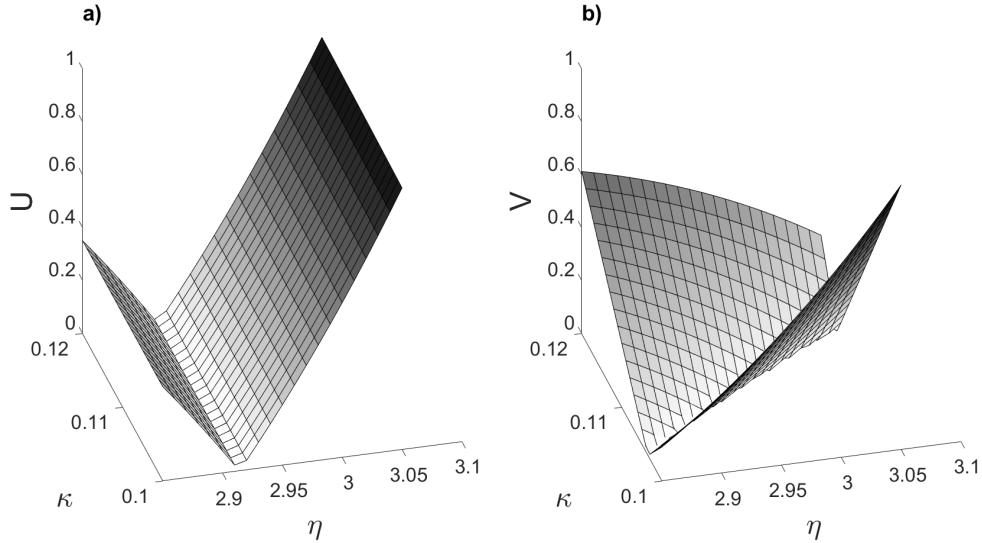


Figura 3.11: a) $\text{Re}[f(\eta, \kappa)]$ y b) $\text{Im}[f(\eta, \kappa)]$ normalizadas evaluadas en un dominio D_2 . Los valores para cada matriz están acotados entre 0 y 1.

3.4. Validación del método

Para validar el método, se estudia el sistema de una interfaz aire-oro, con ambos medios semi-infinitos. Se toma el índice de refracción del aire como $n = 1$, mientras que la función dieléctrica del oro se describe según el modelo de Drude.

En la figura (3.15) se grafican simultáneamente la parte real y la parte imaginaria de las curvas teóricas y de los valores obtenidos mediante el método numérico. También se grafica la frecuencia del plasmón de superficie ω_{sp} . Estos datos se grafican sobre el mapa de dispersión del sistema, el cual se obtiene del método de la matriz de transmitancia que ya se describió previamente. Se

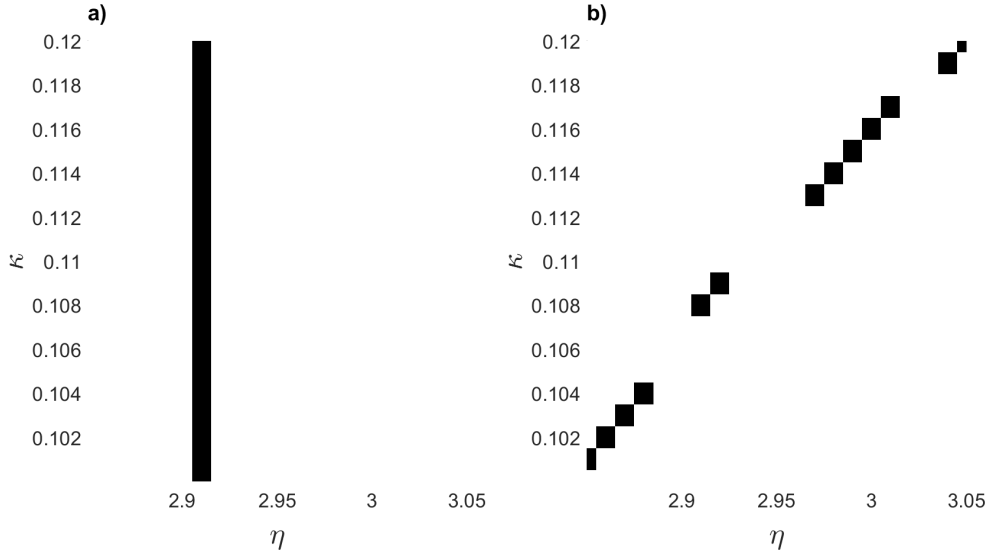


Figura 3.12: Matrices con valores lógicos después del filtrado de datos para a) $U_{m,n}$ y b) $V_{m,n}$ en D_2 .

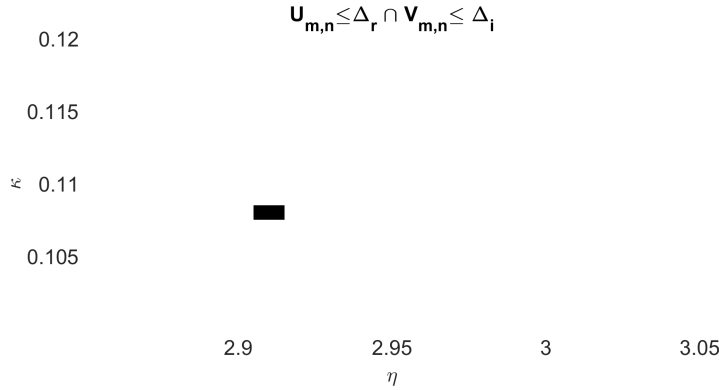


Figura 3.13: Matriz con valores lógicos que contiene los puntos tales que $f(\eta, \kappa) \approx 0$ en D_2 . El dominio en el cual se busca la raíz aproximada disminuyó respecto de los puntos iniciales propuestos.

pretende que los mínimos (regiones oscuras) del mapa de dispersión den una idea general de las regiones en donde se pueden excitar PPS.

Nótese que los valores obtenidos mediante el método numérico corresponden de manera adecuada al comportamiento de las curvas: El modo confinado soportado por el sistema, que es descrito por la curva correspondiente a la parte real del índice de refracción, es una curva que está ubicada a la derecha de la línea de luz del sustrato. Esta curva inicia con valores muy cercanos a la línea de luz del sustrato y crece rápidamente hasta tener una asíntota horizontal en el valor de ω_{sp} ; para valores mayores a esta última cantidad se tiene que la parte real del índice de refracción de la curva tiene valores muy cercanos a cero.

Para valores tales que $\omega < \omega_{sp}$, la parte imaginaria del índice efectivo es muy cercana a cero. En conjunto con la información ya descrita, entre 0 y ω_{sp} los modos soportados (plasmones en bulto) son ondas propagativas confinadas a la interfaz única del sistema, y se propagan con pérdidas prácticamente nulas. El rango definido entre ω_{sp} y 1 es una región donde no pueden ser excitados PPS. La parte imaginaria del índice efectivo en dicha región es diferente de cero, mientras que la

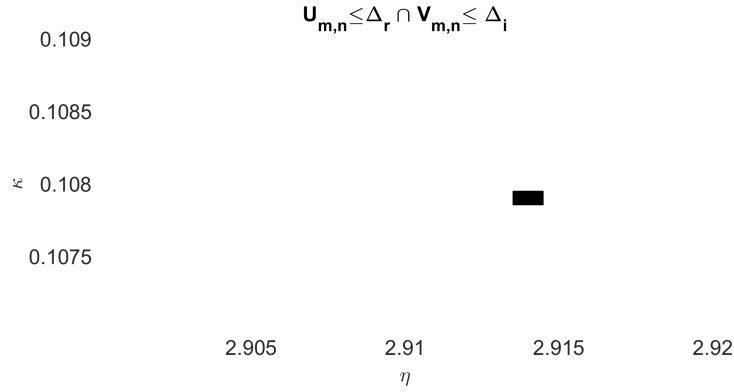


Figura 3.14: Matriz con valores lógicos que contiene los puntos tales que $f(\eta, \kappa) \approx 0$ en D_3 . El dominio en el cual se busca la raíz aproximada disminuyó respecto de los puntos iniciales propuestos, y también respecto del dominio calculado para la segunda iteración.

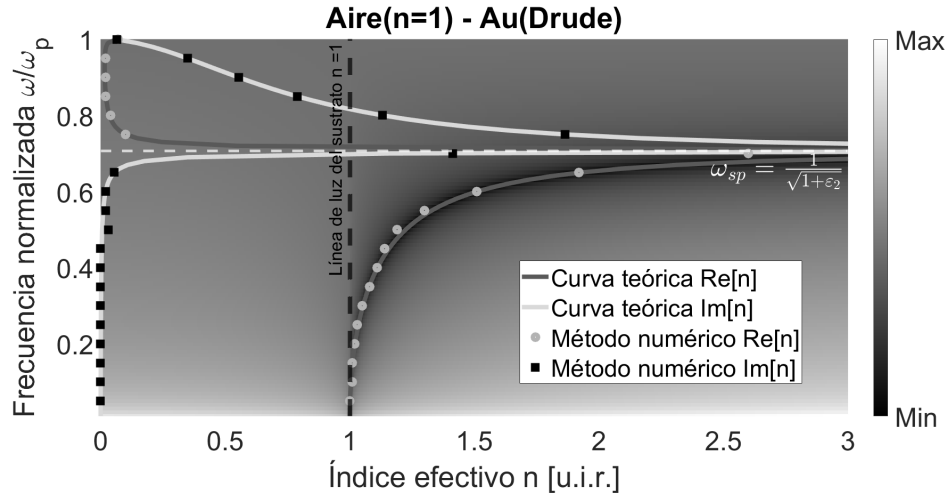


Figura 3.15: Comparación de valores obtenidos mediante método numérico contra curvas teóricas. Sistema de una interfaz aire-oro.

parte real del índice de refracción es muy cercana a cero, y se interpreta como una región en la cual sólo se generan ondas evanescentes. Los datos obtenidos numéricamente al igual que la curva de dispersión teórica correspondientes a la parte real del índice de refracción se ubican sobre los mínimos mostrados por el mapa de dispersión.

Algunos puntos quedan fuera de las curvas anteriormente descritas. Esta ligera discrepancia se atribuye a errores numéricos del método. Considérese importante que el método propuesto resuelve la relación de dispersión de cualquier sistema metafotónico multicapa, sin embargo, estrictamente hablando, para hacer esto tendría que encontrar las raíces exactas de la relación de dispersión, por lo cual es importante tener en mente que este método resuelve aproximadamente la relación de dispersión pero con la mayor precisión posible. Esto también explica el por qué algunos puntos quedan fuera de las curvas mostradas.

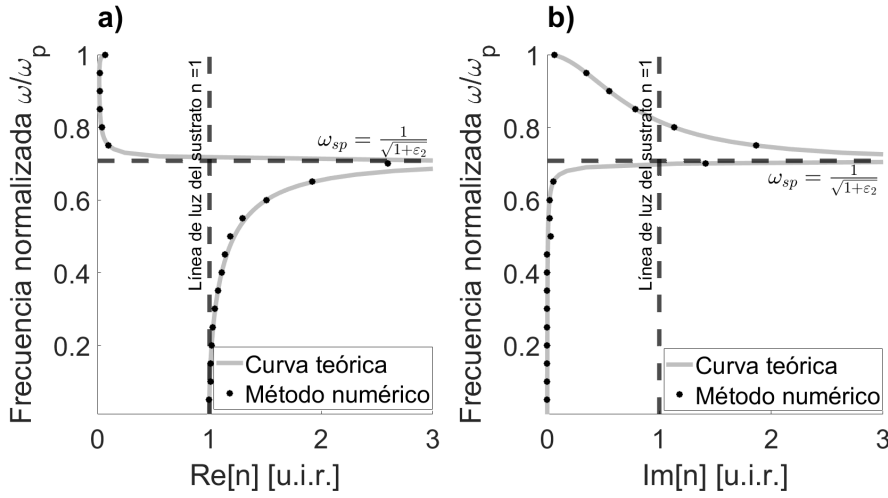


Figura 3.16: Comparativa directa de las curvas teóricas con los datos obtenidos mediante el método numérico. a) Parte real. b) Parte imaginaria.

3.4.1. Validación de métodos para sistemas con pérdidas

Se analiza el sistema bicapa vidrio-oro, con la función dieléctrica del oro descrita por Drude-Lorentz para tres métodos diferentes: un método por aproximación [27], un método en el método descrito en la sección 2.8 [28], y el método desarrollado en este trabajo, a los cuales se hará referencia como R, M, y S, respectivamente. En la Figura (3.17) a) los puntos obtenidos para

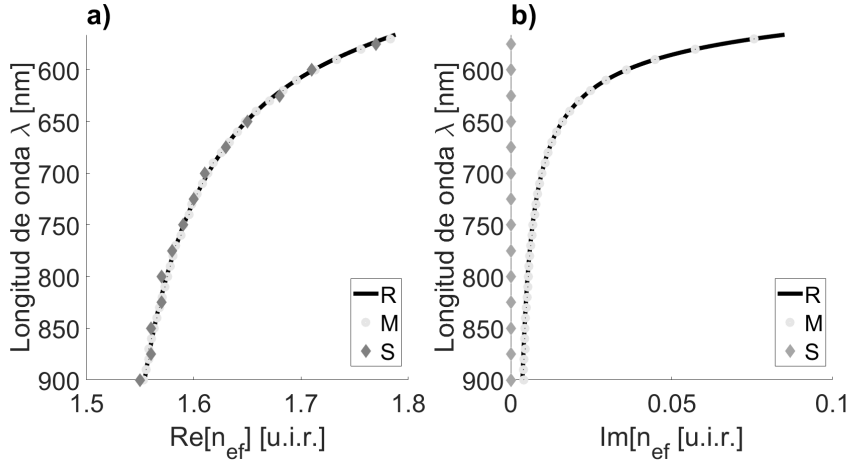


Figura 3.17: Comparación de métodos numéricos. a) Parte real. b) Parte imaginaria

resolver el modo del sistema son muy similares entre sí, presentan un valor máximo para el índice efectivo real para la longitud de onda mínima, cuyo valor disminuye gradualmente hasta llegar a un mínimo para la longitud de onda máxima. El método S presenta ligeras desviaciones, pero se mantiene dentro de la tendencia marcada por la curva descrita por el método R y es acorde a los puntos obtenidos por el método M. No así en la Figura (3.17) b), pues en la parte imaginaria el método S valores de índice efectivo para todo el modo en $n_{ef} = 0$, esto difiere por completo de los datos obtenidos por los métodos R y M, cuyos valores son diferentes de cero, tienen su máximo para la longitud de onda más corta y son inversamente proporcionales a la longitud de onda. Es

importante resaltar que los valores son pequeños, pudiendo ser esta la razón numérica por la cual el método S no obtiene valores diferentes de cero. Así, se considera que el método S es válido para resolver la relación de dispersión, con la observación de que la parte real la resuelve bien, mientras que para la parte imaginaria presenta problemas de convergencia, con la razón aparente de que si el modo del sistema posee valores bajos del índice efectivo imaginario, puede no converger. Tal parece que para valores no tan reducidos sí puede resolver bien la parte imaginaria, tal como se observó para el caso donde se analizó una interfaz aire-oro, con el modelo de Drude. Esto presenta un área de oportunidad, pues el código puede ser mejorado para resolver la relación de dispersión con mejores criterios de convergencia.

3.5. Caracterización de sistemas cuasi-simétricos

Se proponen dos sistemas metafotónicos multicapa cuasi-simétricos para caracterizar, véase figura (3.18), los cuales se componen conforme a la siguiente descripción:

1. Sustrato de SiO₂, capa de Au de 20 nm, capa de SiO₂ de 30 nm, capa de Au de 20 nm y superestrato de Aire.
2. Sustrato de SiO₂, capa de Au de 50 nm, capa de SiO₂ de 30 nm, capa de Au de 50 nm y superestrato de Aire.

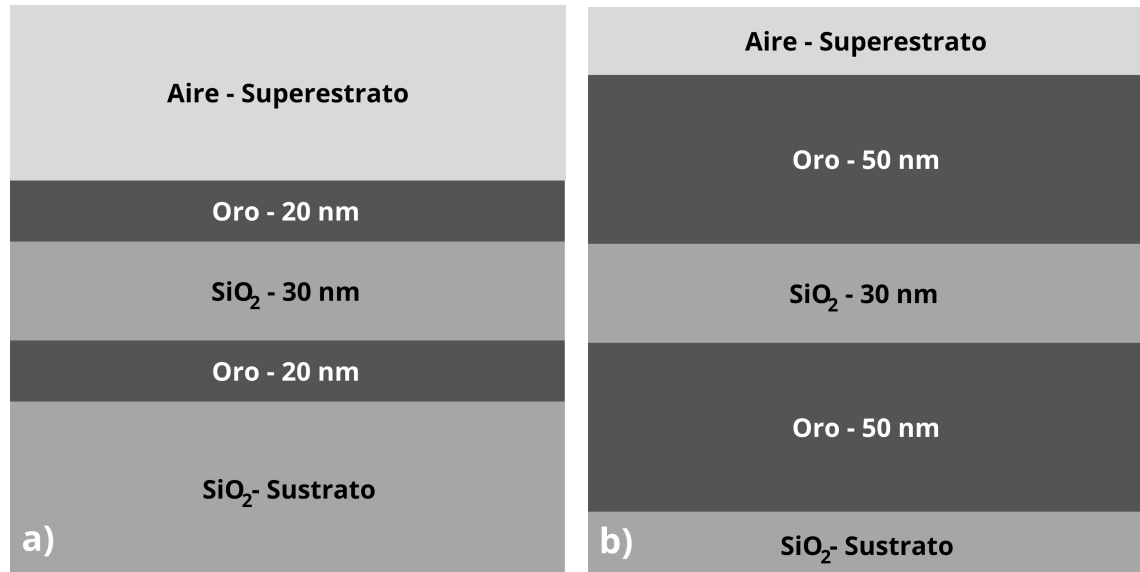


Figura 3.18: Representación gráfica de sistemas cuasi-simétricos analizados. Ambos son sistemas de cinco capas (incluyendo sustrato y superestrato): SiO₂ - Au - SiO₂ - Au - Aire. Espesores de capas intermedias de a) 20, 30 y 20 nm; y b) 50, 30 y 50 nm.

Sistema a)

De la figura (3.19) se tiene que la curva que describe el modo obtenido para el índice efectivo real se ubica a la derecha de la línea de luz del sustrato. Para la longitud de onda más corta (575 nm) el índice efectivo real es máximo, y decrece conforme aumenta la longitud de onda hasta llegar a aproximadamente $\text{Re}[n] = 2.6$ para la longitud de onda más grande (900 nm). Considerando

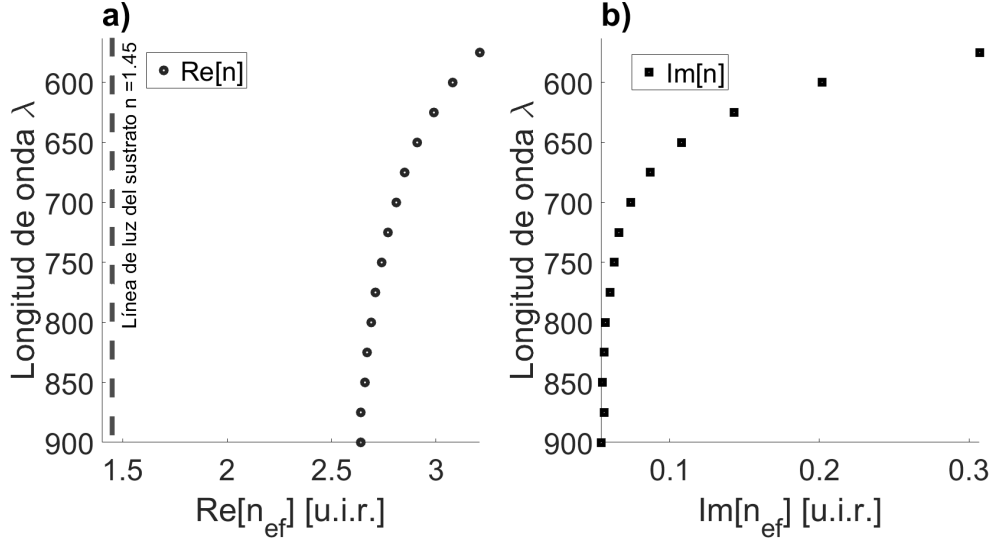


Figura 3.19: Gráfica que muestra el índice de refracción efectivo del sistema cuasi-simétrico a). a) Índice de refracción efectivo real. b) Índice de refracción efectivo imaginario.

este valor mínimo, nótese que el índice de refracción para este modo aumenta en poco más de una unidad respecto del índice de la línea de luz del sustrato.

A su vez, la curva que describe el índice efectivo imaginario del modo sigue un comportamiento similar a la curva de la parte real, pues comienza con un valor máximo para la longitud de onda más corta, en aproximadamente $\text{Im}[n] = 0.32$, y decrece paulatinamente hasta llegar a valores muy cercanos a cero para las longitudes de onda más grandes.

Sistema b)

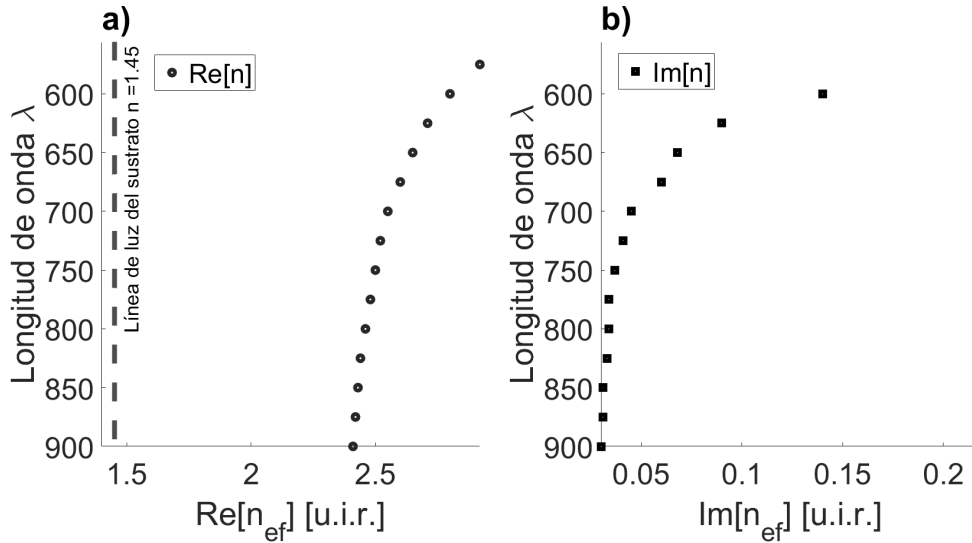


Figura 3.20: Gráfica que muestra el índice de refracción efectivo del sistema cuasi-simétrico b). a) Índice de refracción efectivo real. b) Índice de refracción efectivo imaginario.

De la figura (3.20), el índice efectivo encontrado para el sistema b) exhibe un comportamiento muy similar al del sistema a). En la parte real del índice efectivo se tiene el valor máximo para la longitud de onda más corta, que es visiblemente menor que el del sistema a). Este valor disminuye hasta llegar a un mínimo, en aproximadamente $\text{Re}[n] = 2.4$ para la longitud de onda más grande; el índice de refracción mínimo para este sistema también es aproximadamente una unidad más grande respecto del valor del índice de la línea de luz del sustrato.

En la parte imaginaria se observa el mismo comportamiento decreciente para el índice de refracción conforme aumenta la longitud de onda; dicho comportamiento decreciente describe a los valores para longitudes de onda más grandes cercanos a cero. El valor máximo del índice efectivo imaginario se encuentra por debajo del índice efectivo imaginario del sistema a).

Longitud de propagación

Tanto la parte real como imaginaria del índice efectivo para cada sistema provee de información importante sobre el sistema multicapa. Específicamente, la parte imaginaria da la información necesaria para calcular la distancia de propagación del modo plasmónico. Véase figura (3.21).

La longitud de propagación para los plasmones soportados por los sistemas incrementan a medida que incrementa la longitud de onda incidente. Para ambos modos el valor mínimo es de aproximadamente 400 nm. Las longitudes de propagación para el sistema b) son cada vez mayores respecto del sistema a). Para la longitud de onda más grande, el plasmón soportado por el sistema a) alcanza alrededor de 1400 nm, mientras que a la misma longitud de onda, el plasmón soportado por el sistema b) alcanza aproximadamente los 2500 nm, una propagación de aproximadamente una micra adicional respecto del otro modo.

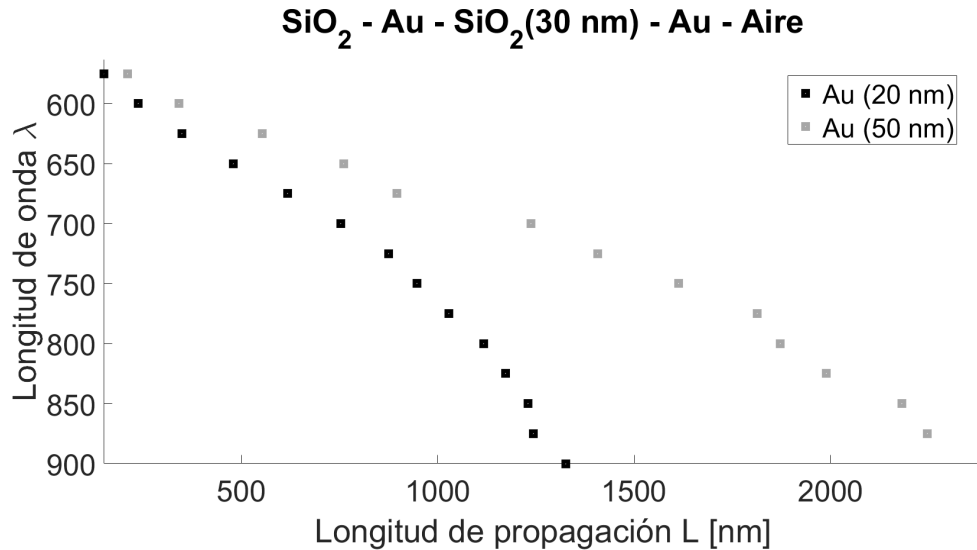


Figura 3.21: Longitud de propagación de los sistemas cuasi-simétricos-

Capítulo 4

Reflectancia de sistemas metafotónicos multicapa con rugosidad

Se hace un estudio de convergencia de CST Studio para simulación de la interacción del campo electromagnético con metamateriales y se compara contra el método de la matriz de Transmitancia. Posteriormente se estudian las implicaciones de las rugosidades en una interfaz real cuando interactúa el campo electromagnético con metamateriales.

4.1. Estudio de convergencia de CST Studio

Como ya se mencionó, CST Studio funciona mediante la discretización del campo electromagnético, discretizando las ecuaciones de Maxwell. Para que los cálculos puedan ser efectuados, de manera similar, el espacio tridimensional en donde se propaga numéricamente la luz en CST Studio debe ser discretizado. Un adecuado estudio de convergencia puede disminuir el tiempo de cómputo requerido para las diferentes simulaciones a realizar.

4.1.1. Dimensiones de sustrato y superestrato

El sustrato y el superestrato de una configuración multicapa tienen espesores finitos en un laboratorio, sin embargo, si se comparan con los espesores de las capas intermedias, las dimensiones de estas últimas son muy pequeñas, por lo que para términos prácticos, en los cálculos teóricos el sustrato y el superestrato se consideran de espesores semi-infinitos. Para cálculos numéricos es necesaria una discretización del espacio, por lo que la suposición de medios semi-infinitos tiene que ser aproximada. Se realiza el siguiente análisis de convergencia para los medios semi-infinitos.

- Se fija el espesor del sustrato en 2500 nm.
- Se coloca como parámetro el espesor del superestrato, de manera que sea una cantidad variable. Los espesores probados son (en nm): 1, 2, 3, 4, 5, 10, 15, 25, 50, 75, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000, 1500, 2000, 2500.
- Se calculan los datos de Reflectancia para un ángulo de incidencia fijo, para un rango fijo de longitudes de onda desde 490 nm a 900 nm, para cada uno de los diferentes espesores del superestrato.

- Se analizan los datos de reflectancia obtenidos. Se compara el conjunto de datos entre dos valores consecutivos del conjunto de valores del parámetro, buscando cuando la diferencia de todos los valores de reflectancia para cada longitud de onda es inferior al 0.1 %
- Cuando se cumple esta condición, se toma el valor más grande del parámetro.

Para el ejemplo donde se tiene un sustrato de $n=1.5$ y un superestrato $n=1$, se establece el superestrato en 900 nm de espesor.

Se realiza el mismo análisis sobre el espesor del sustrato. Se repite el mismo proceso, pero esta vez fijando el espesor del superestrato en 900 nm estableciendo el espesor del sustrato como parámetro. Tras ejecutar un análisis similar, se establece el espesor del sustrato en 300 nm. Estas dimensiones se utilizarán para las simulaciones realizadas en este trabajo.

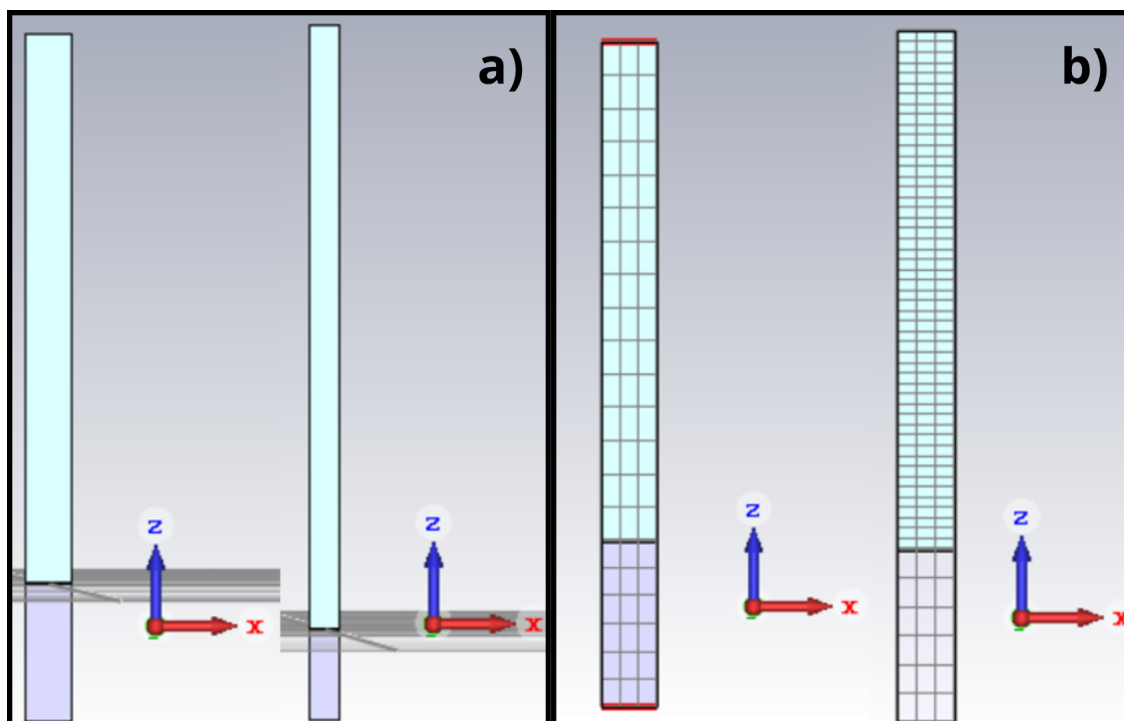


Figura 4.1: a) Se busca el mínimo valor posible para el espesor en cada capa mediante un estudio de convergencia. b) Se busca el mínimo valor posible para las divisiones sobre el eje z en cada capa mediante un estudio de convergencia.

4.1.2. Mallado

CST Studio discretiza el espacio tridimensional en hexaedros. Las divisiones a lo largo del espacio para cada eje cartesiano son asignadas por defecto (15 divisiones por longitud de onda), sin embargo, el número de divisiones puede ser parametrizado (hasta un mínimo de 3 divisiones por longitud de onda).

Se realiza un estudio de convergencia similar al realizado para los espesores del sustrato y superestrato, donde se establece el sistema con las dimensiones encontradas en la sección anterior. Véase Figura (4.1). Primero se analiza la convergencia del mallado para el superestrato, dejando fijo el número de divisiones sobre el eje z que CST Studio asigna por defecto al sustrato, y parametrizando el número de divisiones sobre el eje z del sustrato.

Una vez realizado el estudio de convergencia para ambos mallados, se encuentra que los valores convergen para 20 divisiones sobre el eje z en el superestrato, mientras que para el sustrato se encuentra que la convergencia es adecuada para 6 divisiones.

4.1.3. Coeficientes de reflexión de Fresnel

Como ya se mencionó, para caracterizar un sistema metafotónico multicapa puede usarse la técnica ATR, la cual aprovecha el fenómeno de reflexión total interna. Esta técnica se efectúa numéricamente en CST Studio Suite, por lo que es conveniente revisar los valores de Reflectancia para un sistema que conste sólo de dos capas, en donde la luz incide desde un medio dieléctrico hacia otro de menor índice de refracción. Se escogen los mismos valores para los ejemplos de la teoría: $n_i = 1.5$, $n_t = 1$.

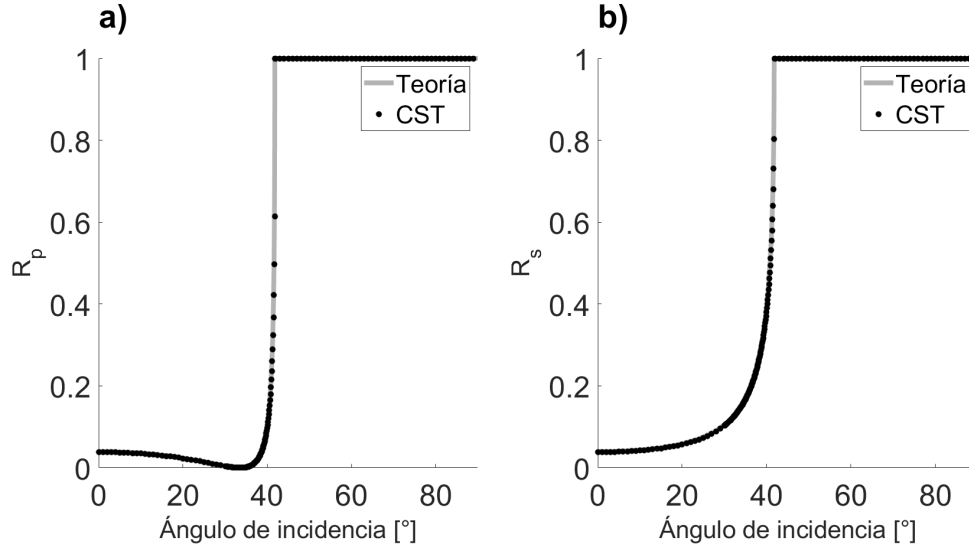


Figura 4.2: Validación de CST studio mediante el cálculo de la reflectancia y transmitancia. a) Reflectancia correspondiente al modo p . b) Reflectancia correspondiente al modo s .

En la Figura (4.2) a) y b) se observa la reflectancia del sistema R_p y R_s , respectivamente, obtenida de simular en CST un sistema de dos interfaces, donde la luz incide desde un medio desde un índice de refracción hacia otro con menor índice, tal que $n_i > n_t$. De estas gráficas se puede presenciar el fenómeno de reflexión total interna, el cual ocurre con las condiciones de iluminación ya mencionadas. Es importante recordar que el fenómeno de reflexión total interna permite acoplar PPS en una interfaz plana empleando la configuración de Kretschmann.

4.2. Validación de CST Studio

Con el fin de validar los mapas de reflectancia obtenidos en CST Studio, estos son comparados con mapas generados con el método de la matriz de transmitancia en MATLAB [6]. Se proponen tres sistemas multicapa para validar CST Studio. Véase figura 4.3

4.2.1. Sistema de cuatro capas

Este sistema multicapa consiste en un sustrato con índice de refracción de $n_{sub} = 1.5$, una capa de Cr de 3 nm de espesor, una capa de Oro de 30 nm, y superestrato de aire con $n_{sup} = 1$.

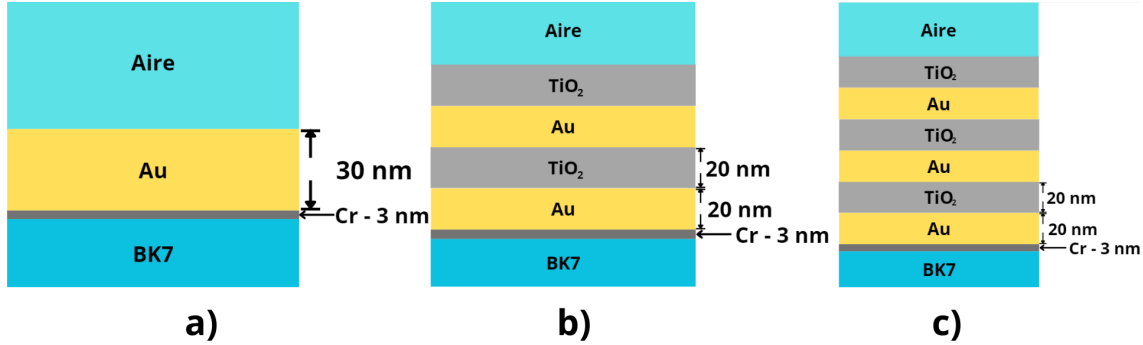


Figura 4.3: Sistemas a estudiar para la validación de cálculos en sistemas multicapa

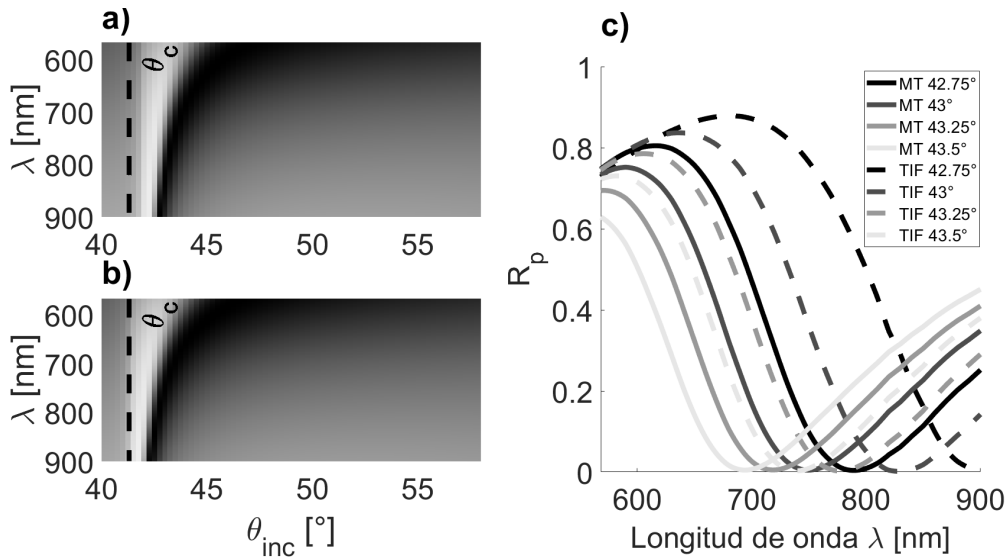


Figura 4.4: Mapas de reflectancia obtenidos para el sistema a) de a) el método de la matriz de transmitancia y b) CST Studio. c) Comparación de curvas de reflectancia del método de la matriz de transmitancia y CST Studio. Se comparan las curvas cuyos ángulos exhiben resonancias plasmónicas.

A simple vista, Figuras (4.4 a)) y (4.4 b)), ambos mapas de reflectancia son semejantes. Sin embargo, es necesario hacer un estudio más riguroso de las diferencias entre los mapas de ambos métodos; el conjunto de información de mayor interés es de aquellos puntos en los cuales hay resonancias plasmónicas, por lo cual se grafica la reflectancia para ángulos de incidencia alrededor de 43° .

De la figura (4.4) es evidente que hay un corrimiento a lo largo de la longitud de onda para la resonancia plasmónica a 42.75° en CST Studio respecto del método de la matriz de transmitancia, a 42.75° la resonancia plasmónica ocurre a una longitud de onda mayor cuando se trabaja con la técnica de integración finita. Para ángulos más grandes también hay un corrimiento en CST Studio, sin embargo se reduce el corrimiento conforme se incrementa el ángulo de incidencia. La posición de los mínimos de cada curva son aproximadamente cero, mientras que los máximos presentan una variación más notoria, ya que el máximo correspondiente a la Técnica de Integración Finita es mayor respecto que el de la matriz de transmitancia.

4.2.2. Sistema con dos periodos de llenado

Este sistema multicapa periódico está compuesto de las mismas dos primeras capas del sistema a) (substrato y capa de Cr). Contiene dos periodos de llenado de Oro y Dióxido de Titanio, cuyos espesores son de 20 nm. La respuesta dieléctrica del oro está modelada según el modelo de Drude-Lorentz.

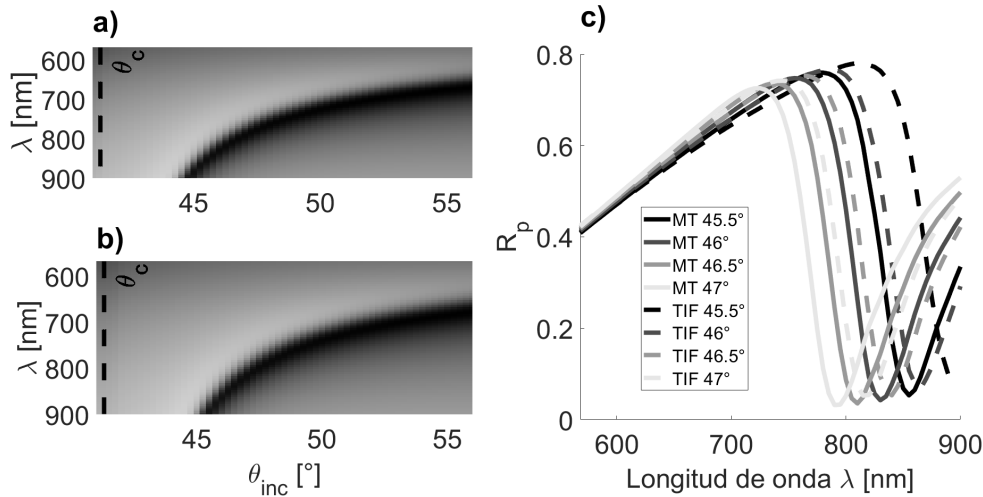


Figura 4.5: Mapas de reflectancia obtenida de a) el método de la matriz de transmitancia y b) de CST Studio. c) Comparación de curvas de reflectancia correspondientes a ángulo que exhiben resonancias plasmónicas.

De las Figuras (4.5) a) y b) se ve que ambos métodos se obtienen bandas similares para la resonancia de plasmones polaritones de superficie. Se observa que, a diferencia del sistema a), la banda de resonancia para este sistema es delgada, y sólo permite excitar resonancias plasmónicas para luz incidente con 650 nm o longitudes de onda mayores. Respecto al ángulo de incidencia, del mapa obtenido del método de la matriz de transmitancia se observa que las resonancias ocurren a partir de 44.5°, mientras que del mapa obtenido de CST se observa que las resonancias ocurren a partir de 45°; entonces, nuevamente se observa un corrimiento en la longitud de onda hacia mayores ángulos para los datos obtenidos por CST Studio respecto del método de la Matriz de transmitancia.

En la Figura (4.5) c) se comparan curvas de reflectancia para luz incidente en el sistema a 45.5°, 46°, 46.5° y 47°. Se observa que todas las gráficas tienen aproximadamente el mismo valor mínimo, tal como ocurre en el sistema a). Para las gráficas correspondientes a la Técnica de Integración Finita se observa un desplazamiento hacia una longitud de onda mayor respecto de las gráficas correspondientes al método de la matriz de transmitancia. La resonancia plasmónica para un ángulo determinado ocurre a una longitud de onda mayor; estas observaciones son consistentes con los resultados del sistema a). Para este sistema se tiene que los máximos de cada curva no varían mucho entre los obtenidos por ambos métodos. A pesar de que existe el corrimiento en la longitud de onda para resonancias plasmónicas, el corrimiento es menor que en el sistema a).

4.2.3. Sistema con tres periodos de llenado

Este sistema multicapa periódico está compuesto de las mismas dos primeras capas del sistema a) (substrato y capa de Cr), y contiene tres periodos de llenado de Oro y Dióxido de Titanio, cuyos espesores son de 20 nm.

De ambos métodos se obtienen bandas de resonancias parecidas, delgadas, pero no tan definidas,

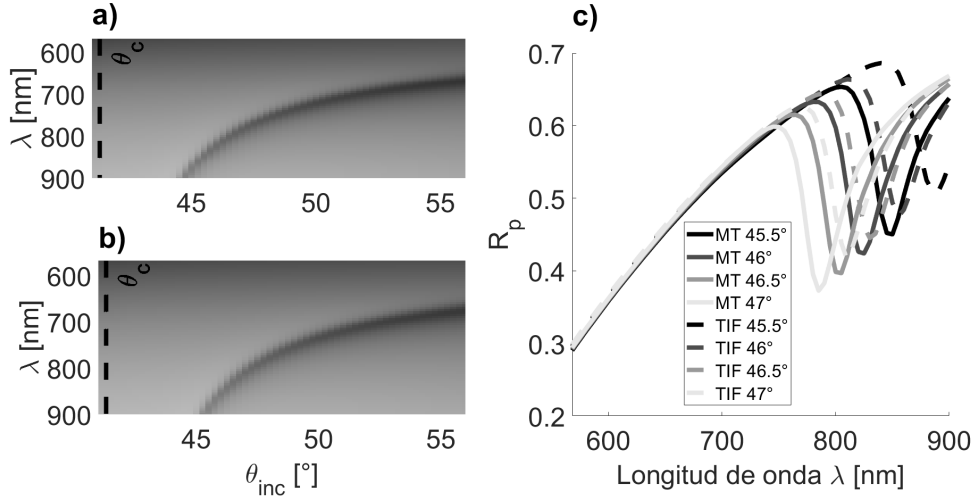


Figura 4.6: Mapas de reflectancia obtenida de a) el método de la matriz de transmitancia y b) de CST Studio. c) Comparación de curvas de reflectancia correspondientes a ángulo que exhiben resonancias plasmónicas.

es decir, no aparecen mínimos de reflectancia tan bajos como los del sistema b); esto quiere decir que en el sistema c) las resonancias plasmónicas pueden ser mejor controladas que aquellas que se exciten con el sistema b). Nuevamente se observa un corrimiento en el ángulo de incidencia, pues para el mapa de reflectancia obtenido del método de la matriz de transmitancia las resonancias comienzan en aproximadamente 44.75° , mientras que para el mapa de reflectancia obtenido de CST Studio las resonancias comienzan en aproximadamente 45.25° .

En la Figura (4.6) c) se comparan curvas de reflectancia para luz incidente en el sistema a los mismos grados de inclinación que los del sistema anterior. El cambio notorio en este sistema es que las curvas de reflectancia poseen diferentes mínimos. Las curvas correspondientes a la técnica de integración finita además de presentar un corrimiento hacia una longitud de onda mayor, presentan una alteración en su valor mínimo, pues las curvas que respectan a la técnica de integración finita tienen su valor mínimo a una reflectancia mayor respecto de las curvas de la matriz de transmitancia, lo cual indica que la resonancia plasmónica se excita de manera más eficientemente para longitudes de onda mayor.

Los tres casos analizados presentan en común un corrimiento de la resonancia plasmónica hacia una longitud de onda mayor dado un ángulo fijo. Es importante tener en mente este corrimiento espectral al estudiar un sistema multicapa en CST Studio con la técnica de integración finita.

4.3. Implementación de interfaces rugosas en CST Studio

Computacionalmente, es más eficiente calcular los mapas de reflectancia con el método de la Matriz de Transmitancia que con CST Studio. Para el método de la matriz de Transmitancia se considera que las interfaces de cada capa son ideales, totalmente planas y sin rugosidades, es decir, se realizan cálculos numéricos ideales; en la realidad, las interfaces están lejos de ser totalmente planas. Cuando se construye un metamaterial, independientemente del tipo de deposición que se ocupe para generar cada capa, existirán rugosidades [31–33]. Véase (4.7) a).

Para realizar cálculos de técnica ATR más realistas, se modelan rugosidades en CST Studio a partir de imágenes reales con plano cenital. Esto es posible mediante software de modelado en 3D. Usando el software Blender, con el modificador *Displace* se copia la textura de una imagen 2D en la cara de un paralelepípedo para simular rugosidades realistas. Para modelar adecuadamente las

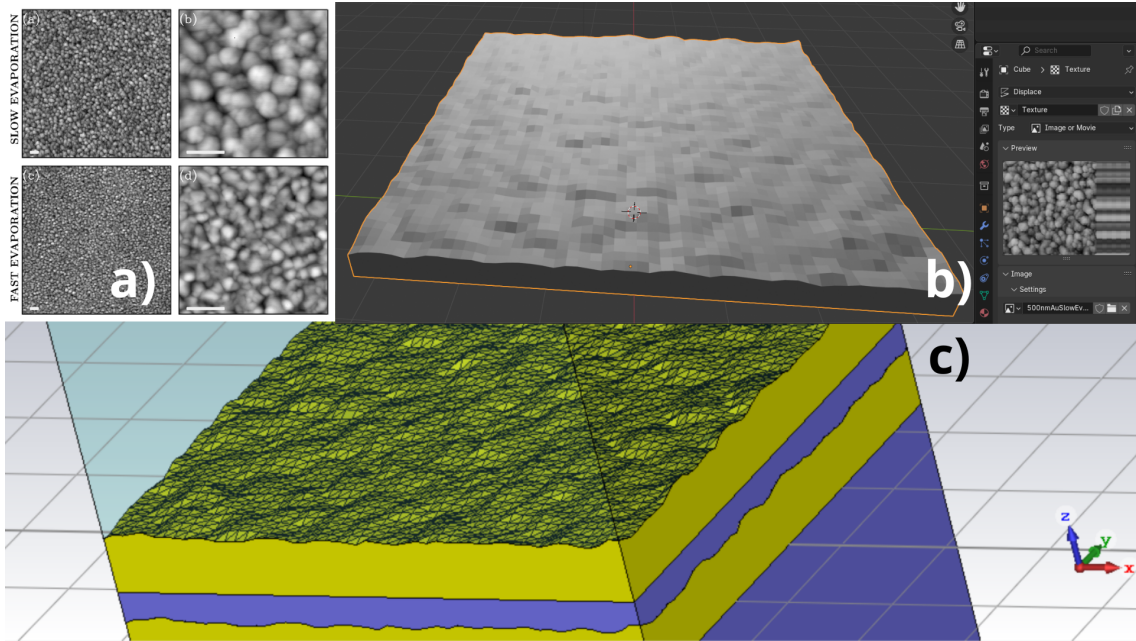


Figura 4.7: a) Imágenes de rugosidades en películas delgadas. Extraídas de [31]. b) Modelado de rugosidades a partir de imágenes. c) Importación de modelo 3D para simular interfaces rugosas en CST Studio.

rugosidades es necesario contar el dato que especifique la altura máxima y mínima de las rugosidades. En las imágenes tomadas de la referencia [31], se presentan dos muestras cuya deposición fue realizada por evaporación, la primera muestra corresponde a lo que denominan deposición lenta, mientras que la segunda corresponde a lo que denominan deposición rápida. Se especifica que la variación máxima en alturas es de 11.89 nm, y 9.63 nm para las películas de oro por deposición lenta y rápida, respectivamente. Conociendo estas alturas, se modificó la textura para que las rugosidades modeladas tuvieran la misma dimensión que el sistema a simular, por ejemplo, en la Figura (4.7) b) se construyó una capa delgada de 500 nm de longitud por lado, con espesor de 50 nm; para configurar las rugosidades, se estableció que los puntos de mayor altura quedaran ubicados a $50 + 5.95$ nm, mientras que los puntos mínimos a $50 - 5.95$ nm, conservando la altura original de las rugosidades especificada por el artículo [31]. Una vez modelada la interfaz rugosa con el espesor requerido, se puede exportar el modelo en formato .obj, el cual es leído por CST Studio. Una vez que se importa el modelo 3D en CST Studio, es desplazado, escalado y rotado manualmente dentro del programa. Se pueden modelar las interfaces rugosas necesarias en CST Studio para obtener sistemas multicapa con varias interfaces rugosas, véase Figura (4.7) c).

4.4. Sistema con interfaz rugosa

Para observar qué diferencias hay entre estudiar interfaces planas ideales e interfaces rugosas, se toma el sistema multicapa a) de la Figura (4.3), y se modela la interfaz metal-superestrato como una interfaz rugosa, cuya variación en altura máxima es de ± 2.5 nm, esto con el objetivo de analizar qué tanto afectan rugosidades pequeñas. Se generan los mapas de reflectancia para ambos casos.

Se observan bandas de excitación similares para el caso de interfaces ideales y para el caso donde se tiene una interfaz rugosa. Para analizar rigurosamente las diferencias entre ambos métodos, se centra la atención en los primeros ángulos que presentan resonancias plasmónicas.

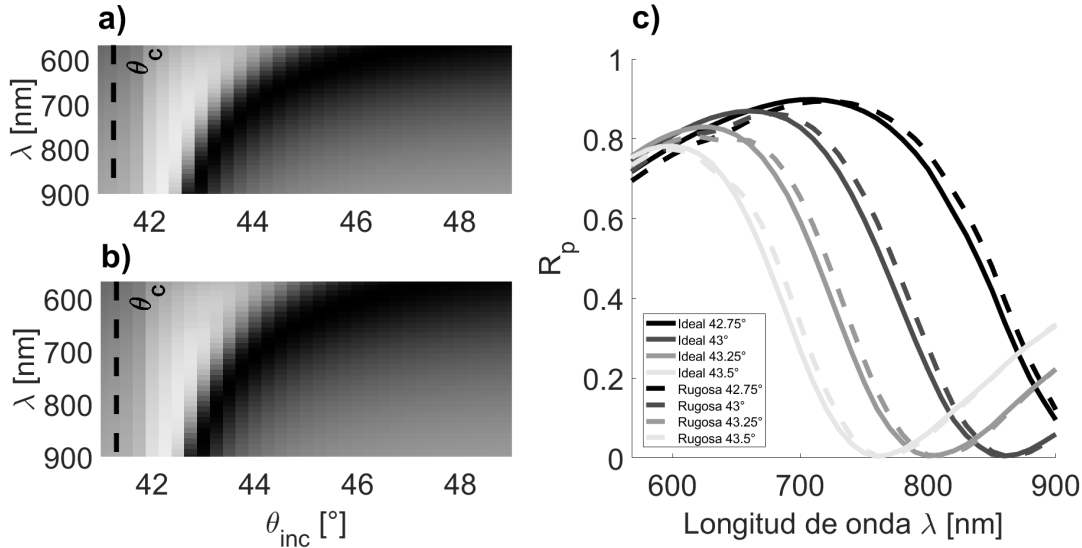


Figura 4.8: a) Mapas de reflectancia para el caso con interfaces planas ideales y mapas de reflectancia para el caso donde se modela una interfaz rugosa b). c) Comparación de curvas de reflectancia para ángulos fijos.

Se observa que se presentan pequeños corrimientos hacia una longitud de onda mayor para el caso con interfaz rugosa respecto del caso ideal. Los mínimos en la reflectancia son prácticamente los mismos. Las mayores diferencias radican en que para el caso ideal los puntos cercanos a los máximos de reflectancia (valles) son parecidos a parábolas, pero por otra parte, para el caso donde se tiene una interfaz rugosa, cerca de los máximos, las curvas presentan pequeñas caídas de intensidad, las cuales son más evidentes para 43° y 43.25°.

4.4.1. Rugosidades reales

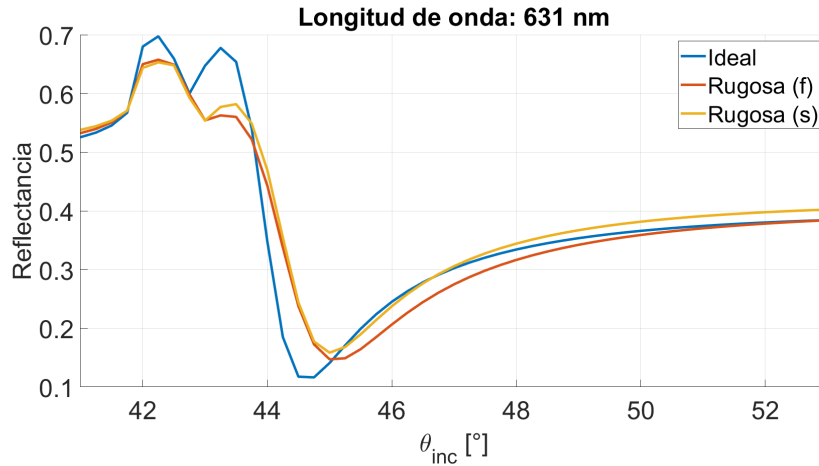


Figura 4.9: Curvas de reflectancia para una interfaz real, una interfaz rugosa deposición rápida y una interfaz rugosa con deposición lenta a 631 nm.

Se estudia el mismo sistema de la sección anterior, pero a diferencia de modelar las rugosidades

de manera arbitraria, en este caso se modelan de acuerdo a las dimensiones correctas, es decir, las variaciones de altura en rugosidades para deposición lenta y rápida son de 11.89 nm y 9.63 nm. Las dimensiones en altura de estas rugosidades son de al menos el doble que las modeladas en el sistema anterior.

En la figura (4.9) las tres curvas inician en el mismo valor. Se observa que para las tres curvas se tiene un mínimo local en 43° , y 43.5° para la interfaz real y las interfaces rugosas, respectivamente. Las interfaces rugosas comparten ese mínimo, el cual se ubica por debajo del de la interfaz real. Las curvas correspondientes a las interfaces rugosas muestran un corrimiento hacia un ángulo mayor, donde el mínimo alcanzado es más grande que el de la curva de la interfaz real. Después de los 48° se observa un comportamiento similar para las tres curvas.

Las curvas obtenidas para rugosidades con diferencia en altura mayor a 5 nm presentan una mayor variación en su reflectancia respecto del caso donde se tiene una interfaz real. Estas observaciones deben ser tomadas en cuenta cuando se quieran realizar una comparación entre resultados numéricos y experimentales, pues el mínimo es más grande y tiene un corrimiento para un ángulo de incidencia mayor.

Capítulo 5

Conclusiones

La implementación del método de la matriz de transmitancia, el cual contiene toda la información del sistema multicapa que se esté estudiando, funciona para sistemas conformados por dieléctricos y metales simultáneamente. Para validar este método se calcularon los coeficientes de reflectancia de Fresnel, que concordaron con lo visto en la literatura. La información interpretada a partir de los mapas de ATR permitió conocer las condiciones de iluminación necesarias en ángulo y longitud de onda para excitar modos radiados de resonancias plasmónicas.

A partir de la teoría de Mie se calculó la longitud de onda de corte para varias interfaces dieléctrico-metal para diferentes funciones dieléctricas del metal. Esta cantidad es análoga a la frecuencia de plasmón de superficie ω_{sp} en sistemas dieléctrico-metal de Drude de una interfaz. El cálculo de la frecuencia de corte λ_{csp} se realizó para la interacción entre varios medios dieléctrico-oro, cambiando el material dieléctrico y la función dieléctrica del oro, para lo cual se empleó interpolación de datos. Las frecuencias de corte obtenidas acotan la región en la cual es posible generar resonancias plasmónicas, que permitió optimizar cálculos numéricos para simular la técnica ATR o para encontrar los modos propios de un sistema al resolver la relación de dispersión de un sistema. Los valores obtenidos para las frecuencias de corte son consistentes con lo observado para la frecuencia de plasmón de superficie, pues al aumentar el valor del índice de refracción del medio dieléctrico, aumenta el valor de la longitud de onda de corte.

La solución de la relación de dispersión para sistemas de más de tres capas requirió la búsqueda e implementación de métodos numéricos. El método desarrollado en este trabajo funciona con la premisa de que debe ser resuelta la parte real e imaginaria de la relación de dispersión simultáneamente, para lo cual se estableció que la relación de dispersión debe ser resuelta para una sola longitud de onda a la vez, esto para obtener dos funciones de dos variables, en lugar de tres, y mediante la evaluación de dichas funciones en un mismo dominio, encontrar la solución buscando los mínimos simultáneos en cada función. El dominio de búsqueda de soluciones complejas se define en un conjunto de nivel, el cual se acota iterativamente mediante la intersección de los mínimos del módulo de la parte real e imaginaria de la relación de dispersión.

El método fue validado al compararse con la teoría para sistemas de una sola interfaz dieléctrico-oro, con ambos medios semi-infinitos y con la respuesta dieléctrica del oro descrita por el modelo de Drude para el oro. Es importante recordar que el método implementado resuelve de manera aproximada y no exacta la relación de dispersión del sistema, es decir, no encuentra los ceros de la función, pero sí valores muy cercanos a cero. Esto es notorio en los casos presentados en el capítulo 3, donde gráficamente se observa que las soluciones obtenidas son aproximaciones. El método implementado presenta un área de oportunidad para mejorarse cuando se tienen sistemas multicapa con parte imaginaria de índice efectivo con valores cercanos a cero, sin embargo, parece ser muy eficiente para encontrar la parte real del índice efectivo. Se planea seguir dando continuidad a este trabajo en el futuro para tener una versión mejorada del código presentado que resuelva con mejor precisión la parte imaginaria de la relación de dispersión de un sistema metafotónico.

multicapa. La rutina del código que reduce iterativamente el dominio de búsqueda para las raíces aproximadas de la relación de dispersión funcionó, ya que redujo mucho el tiempo de cómputo en comparación con el caso de evaluar en un dominio fijo con subdivisiones muy pequeñas.

Una limitante actual del código es que solamente puede encontrar un modo plasmónico, así que un área de oportunidad es implementar una subrutina para calcular más de un modo.

A partir de la parte imaginaria del índice de refracción efectivo de los sistemas estudiados se obtuvo la longitud de propagación de las ondas de los modos soportados, donde se observó que las longitudes de propagación de los modos depende de la geometría del sistema multicapa. En los sistemas estudiados, las longitudes de propagación están en el orden de decenas de micra.

Se comparó el método de la matriz de transmitancia contra el método de integración finita para diversos sistemas. En todos se observó algo en común: los cálculos hechos con la técnica de integración finita difieren ligeramente, ya que las resonancias plasmónicas aparecen a una longitud de onda ligeramente mayor; este punto es importante y debe considerarse cuando se hagan cálculos con CST Studio. Cuando se realizan cálculos de un sistema ATR conviene hacerlo con el método de la matriz de transmitancia, ya que el método logra obtener los datos del sistema en un par de segundos incluso en una computadora común y corriente. CST Studio es preciso al compararse con el método de la matriz de transmitancia, pero es recomendado si se cuenta con una computadora con tarjeta gráfica integrada.

Se observó que para un sistema periódico con tres fracciones de llenado colocado sobre una capa de cromo, y a su vez todo depositado sobre un sustrato de vidrio, las resonancias plasmónicas acopladas son más eficientes conforme aumentan a la par la longitud de onda y el ángulo de incidencia de la luz. Las bandas de mínimos mostradas por los mapas de reflectancia disminuye conforme se aumenta el número de capas en un sistema periódico. Esto es útil para caracterizar metamateriales que requieran condiciones muy específicas para la generación de resonancias plasmónicas.

Si bien el método de la matriz de transmitancia es efectivo para encontrar las condiciones de acoplamiento para resonancias plasmónicas radiadas en un sistema metafotónico, es importante recordar que el método de la matriz de transmitancia se limita a metamateriales con superficies planas ideales, por lo que si se requiere simular estructuras más complejas, por ejemplo, rugosidades, es conveniente trabajar con CST Studio.

Se modelaron rugosidades reales de películas delgadas de oro en sistemas multicapa, lo cual permitió estudiar casos más allá de la idealización de interfaces totalmente planas de los sistemas metafotónicos. Este planteamiento de interfaces rugosas permitió analizar de manera realista las condiciones necesarias para la excitación de resonancias plasmónicas. Se observó que una interfaz con rugosidades de aproximadamente 5 nm presenta efectos mínimos sobre las curvas de reflectancia, pues sólo disminuye ligeramente el valor máximo de la curva de reflectancia. Cuando se analiza el mismo sistema pero con rugosidades que mantengan proporciones reales, se nota un desplazamiento del mínimo de reflectancia a mayores ángulos de incidencia. Asimismo, aumenta el valor mínimo de la reflectancia. Estos valores tienen que tomarse en cuenta al realizarse experimentos.

Se observó la siguiente área de oportunidad para trabajo a futuro: mediante con simulaciones de CST Studio se podría analizar el efecto de rugosidades en el esparcimiento por iluminación con fuentes puntuales así como su influencia en la generación de resonancias localizadas.

Apéndice A

Anexo

En este anexo se incluye una versión del código desarrollado en MATLAB para resolver la relación de dispersión de sistemas metafotónicos multicapa y así encontrar sus respectivos modos plasmónicos soportados. Esta versión sólo puede resolver un modo a la vez.

Las líneas comentadas con la frase *Solver multimodos*, funciona para resolver los dos modos de sistemas de dos interfaces en configuración IMI para espesores del metal menores a 50 nm, pero no funciona la reducción iterativa de dominio y por ende, tarda mucho en ejecutarse.

```

clear all % Borra todas las variables del Workspace
close all % Cierra todas las ventanas abiertas en MATLAB, como las gráficas
clc

tic % Inicio del cronómetro de ejecución del programa
pol = 0; % Polarización de la fuente de luz (=0 TM, =1 para TE)
N = 3;
n = 2 + N; % Número de capas totales (intermedias+ sustrato+ superestrato)
nsb = 1.45; % Índice de refracción del sustrato
nsp = 1.0; % Índice de refracción del superestrato
epsSb = nsb^2; % Permitividad eléctrica del sustrato
epsSp = nsp^2; % Permitividad eléctrica del superestrato
lam_ini = 400; % Longitud de onda inicial (nm)
lam_end = 900; % Longitud de onda final (nm)
spc = 1; % Espaciado entre longitudes de onda
wl = (lam_ini:spc:lam_end); % Vector que genera el espectro
lam = wl*1e-9; % Espectro de longitudes de onda (m)
c = 2.99792458e8; % Velocidad de la luz en el vacío
w = 2*pi*c./lam; % Frecuencia angular del espectro definido
numw = numel(w); % Cuenta el número de elementos del espectro
wlc = 563; % Longitud de onda de corte

%% Modelo de Drude
wp = 1.36063*10^(16); % Frecuencia de plasma para el oro
gm = 1.0769*10^14; % Tiempo de relajación de los electrones
b = gm/(2*wp);
epsAud = 1 - 1./((wl+1i*b).^2+b^2); % Modelo con pérdidas
% epsAud = 1 - 1./(wl.^2); % Modelo sin pérdidas

%% Modelo de Drude-Lorentz (se adjunta código)
epsAu = Drude_Lorentz_Vial(w);

%% Funciones dieléctricas de diferentes materiales dieléctricos
epssub=zeros(1,numw);
epssup=zeros(1,numw);
for j=1:numw
    epssub(j)=nsb^2;
    epssup(j)=nsp^2;
end

d = [50,30,50]; % Espesor de cada capa intermedia
zd = zeros(1,length(d)+1); % Vector que guarda la posición de cada interfaz
zd(1)=0.0; % Posición de la primera interfaz
for ii = 1:N % Ciclo para guardar la posición de cada interfaz
    zd(ii+1) = zd(ii) + d(ii);
end

%% Obtención simbólica de Matriz T del sistema
syms eps [1 n] % Se definen n valores simbólicos para epsilon

```

```

syms X k0          % Se definen valores simbólicos para k0 y el índice efectivo
syms z [1 N+1]    % Se definen n número de interfaces (capas intermedias + 1)

Tang=[1 0; 0 1];   % Ciclo para generar la relación de dispersión simbólica
for kk = 1:numel(z)
    alpham = k0*sqrt(eps(kk) - X^2);
    alpham1 = k0*sqrt(eps(kk+1) - X^2);
    if pol == 0
        nu_j = eps(kk);
        nu_j1 = eps(kk+1);
    elseif pol == 1
        nu_j = 1.0;
        nu_j1 = 1.0;
    end
    km = alpham*z(kk);
    km1 = alpham1*z(kk);
    Dk=km-km1;
    Sk=km+km1;
    gamma = (nu_j1./nu_j).*(alpham./alpham1);
    a11 = (1+gamma)*exp(1i*Dk);
    a12 = (1-gamma)*exp(-1i*Sk);
    a21 = (1-gamma)*exp(1i*Sk);
    a22 = (1+gamma)*exp(-1i*Dk);
    Tjang = 0.5*[a11 a12; a21 a22];
    Tang = Tjang*Tang;
end

%% Ciclo para obtener el índice de refracción efectivo
bv= 575:25:900; % Valores a evaluar
for ib = 1:length(bv) % Ciclo que evalúa las longitudes de onda
    i = find(abs(wl-bv(ib))<0.001);
    epsn = [epsSb,epsAu(i),epsSb,epsAu(i),epsSp]; % Epsilon de cada capa
    t22 = subs(Tang(2,2),[z,k0,eps],[zd,2*pi/wl(i),epsn]);

    xx1 = 2.35001; % Se acota la región de búsqueda
    xmin = xx1;
    xx2 = 3.00001;
    xxi1 = 0.000001;
    xmini = xxi1;
    xxi2 = 0.300001;

    spcn = [0.1,0.01,0.001]; % Espaciado para el dominio
    for ij = 1:2
        xx = xx1:spcn(ij):xx2; % Se genera el dominio real
        xxi = xxi1:spcn(ij+1):xxi2; % Se genera el dominio imaginario

        [XR,YR] = meshgrid(xx,xxi);
        XY = zeros(length(xxi),length(xx)); % Dominio bidimensional
        for ic = 1:length(xxi)

```

```

        XY(ic,:) = li.*xxi(ic)+xx;
end

f = double(subs(t22,XY(:,:))); % Se evalúa la relación de disp.

tol = 0.01:0.01:0.5;          % Tolerancia para obtención de datos
for it = 1:length(tol)
    fn = f./max(max(f));          % Se normalizan f
    fr=abs(real(fn));             % Absoluto de la parte real de fn
    fi=abs(imag(fn));             % Absoluto de la parte imaginaria de fn

    limir = min(min(fr));         % Valor mínimo de la matriz fr
    limsr = max(max(fr));         % Valor máximo de la matriz fr
    limii = min(min(fi));         % Valor mínimo de la matriz fi
    limsi = max(max(fi));         % Valor máximo de la matriz fi

    Dr = limsr-limir;           % Rango de valores de la matriz fr
    Di = limsi-limii;           % Rango de valores de la matriz fi

    Delr = limir+tol(it)*Dr;      % Tolerancia de la matriz fr
    Deli = limii+tol(it)*Di;      % Tolerancia de la matriz fi
    Delmx = max(Delr, Deli);      % Tolerancia máxima de fr o fi

    fr(fr>Delmx)=0;              % Filtro de datos parte real
    fi(fi>Delmx)=0;              % Filtro de datos parte imaginaria

    Mapp = fr & fi;              % Intersección de filtros
    dc = all(all(Mapp==0));       % Detiene el ciclo de tolerancia
    if dc == 0
        break
    end
end

[ri,rr] = find(Mapp); % Índices de elementos que se intersectan
mxr = max(rr);         % Índice máximo real
mnr = min(rr);         % Índice mínimo real
mxi = max(ri);         % Índice máximo imaginario
mni = min(ri);         % Índice mínimo imaginario

xrmax = xx(mxr);       % Valores de índice de refracción real y
xrmin = xx(mnr);       % complejo correspondientes a los máximos y
ximax = xxi(mxi);      % mínimos del mapa
ximin = xxi(mni);

xx2 = xrmax;           % Límites real e imaginario del nuevo dominio
xx1 = xrmin;
xxi2 = ximax;
xxi1 = ximin;

%% Condiciones especiales para el nuevo dominio
if xx1 == xx2

```

```
        xx1 = xx1 - spcn(ij);
        xx2 = xx2 + spcn(ij);
    end

    if xx1 < xmin
        xx1 = xmin;
    end

    if xxi1 == xxi2
        xxi1 = xxi1 - spcn(ij+1);
        xxi2 = xxi2 + spcn(ij+1);
    end

    if xxi1 < xmini
        xxi1 = xmini;
    end
end
reduxf = f(Mapp);
abreduxf = abs(reduxf);

%% Solver multimodos, determina los dos valores más cercanos a cero**
% lminf = islocalmin(abreduxf);
% minm = abreduxf(lminf);
% mm = 2;
% for lmn = 1:mm
%     lmip(lmn) = find(abs(minm(lmn)-abreduxf)<0.0000001);
%     rrlm(ib,lmn) = xx(rr(lmip(lmn)));
%     rilm(ib,lmn) = xxi(ri(lmip(lmn)));
% end

%% Solver de un solo modo, determina el valor más cercano a cero
minf = min(abreduxf);
ip = find(abs(minf-abreduxf)<0.0000001);
rrm(ib) = xx(rr(ip));
rim(ib) = xxi(ri(ip));

contl = bv(ib) % Contador para seguimiento del código
end
toc % Fin del cronómetro de ejecución

%% Graficador. Grafica simulatáneamente la parte real e imaginaria de n
figure(1)
axes('FontSize',30)
hold on
set(gca,'YDir','reverse');
xline(nsb,'--k',['Línea de luz del sustrato n =',num2str(nsb)],...
    LineWidth=5,FontSize=20,LabelHorizontalAlignment='left',...
    LabelVerticalAlignment='top')
p1=plot(rrm, bv, 'o', 'Color',[0.70 0.70 0.70],LineWidth=4, ...
```

```
    DisplayName='Método numérico Re[n]');  
p2=plot(rim, bv, 's', 'Color',[0.0 0.0 0.0],LineWidth=4, ...  
    DisplayName='Método numérico Im[n]'); %  
legend([p1 p2], 'Location','best')  
title('SiO_2 - Au(50 nm) - SiO_2 -Au(50 nm) - Aire')  
xlabel('Índice efectivo n [u.i.r.]')  
ylabel('Longitud de onda \lambda')  
xlim([0 3.2])  
ylim([wlc lam_end])  
hold off
```

%***** Modelo de Drude-Lorentz de acuerdo a A. Vial, et. al.

function epsAu=Drude_Lorentz_Vial(w)

epsL_inf=5.9673;

wD=2*pi*2113.6e12;

gD=2*pi*15.92e12;

omegaL=2*pi*650.07e12;

GL=2*pi*104.86e12;

Deps=1.09;

epsAu=epsL_inf-(wD.^2./(w.*(w+1i.*gD))) - ...
(Deps.*omegaL.^2./((w.^2.-omegaL.^2)+1i.*GL.*w));

Bibliografía

- [1] A. Sommerfeld. Ueber die fortpflanzung elektrodynamischer wellen längs eines drahtes. *Annalen der Physik vol. 303 iss. 2*, 303, 1899.
- [2] J. Zenneck. Über die fortpflanzung ebener elektromagnetischer wellen längs einer ebenen leiterfläche und ihre beziehung zur drahtlosen telegraphie. *Annalen der Physik vol. 328 iss. 10*, 328, 1907.
- [3] E. Kretschmann and H. Raether. Notizen: Radiative decay of non radiative surface plasmons excited by light. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 23, 12 1968.
- [4] Alexander Baev, Paras N. Prasad, Hans Ågren, Marek Samoć, and Martin Wegener. Metaphotonics: An emerging field with opportunities and challenges. *Physics Reports*, 594:1–60, 2015. Metaphotonics: An emerging field with opportunities and challenges.
- [5] S.A. Maier. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer US, 2007.
- [6] Jonathan Ramírez Aragón. Excitación de modos híbridos fotónicos-plasmónicos en metamateriales hiperbólicos. Tesis de maestría, BUAP, 2023.
- [7] Emmanuel Velázquez Hermenegildo. Análisis teórico-numérico de modos plasmónicos en sistemas multicapa. Tesis de licenciatura, BUAP, 2023.
- [8] M. G. Moharam and T. K. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. *J. Opt. Soc. Am.*, 71(7):811–818, Jul 1981.
- [9] Paul S. Davids. Normal vector approach to fourier modal scattering from planar periodic photonic structures. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, 43:100864, 2021.
- [10] Ricardo Tellez-Limon, Mickael Fevrier, Aniello Apuzzo, Rafael Salas-Montiel, and Sylvain Blaize. Theoretical analysis of bloch mode propagation in an integrated chain of gold nanowires. *Photon. Res.*, 2(1):24–30, Feb 2014.
- [11] E. Hecht. *Optics*. Pearson Education, Incorporated, 2017.
- [12] David J Griffiths. *Introduction to electrodynamics; 4th ed.* Pearson, Boston, MA, 2013. Republished by Cambridge University Press in 2017.
- [13] Bahaa E A Saleh and Malvin Carl Teich. *Fundamentals of photonics; a Ed.* Wiley series in pure and applied optics. Wiley, New York, NY, 2019.
- [14] John David Jackson. *Classical electrodynamics; 2nd ed.* Wiley, New York, NY, 1975.
- [15] C. Bohren and D. R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley Science Paperback Series, 1998.

- [16] G.B. Arfken, H.J. Weber, and F.E. Harris. *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide; 7ma Ed.* Elsevier Science, 2012.
- [17] Dmitry I. Yakubovsky, Aleksey V. Arsenin, Yury V. Stebunov, Dmitry Yu. Fedyanin, and Valentyn S. Volkov. Optical constants and structural properties of thin gold films. *Opt. Express*, 25(21):25574–25587, Oct 2017.
- [18] Mohamed Eldlio, Franklin Che, and Michael Cada. Drude-lorentz model of semiconductor optical plasmons. *Lecture Notes in Electrical Engineering*, 247:41–49, 01 2014.
- [19] S. Enoch and N. Bonod. *Plasmonics: From Basics to Advanced Topics*. Springer Series in Optical Sciences. Springer Berlin Heidelberg, 2015.
- [20] T. Weiland. A discretization method for the solution of maxwell’s equations for six-component fields. in *Electronics and Communications (AEÜ)*, 31:116–120, 02 1977.
- [21] René Marklein. *The Finite Integration Technique as a General Tool to Compute Acoustic, Electromagnetic, Elastodynamic, and Coupled Wave Fields*, pages 201–244. 10 2002.
- [22] Markus Clemens and Thomas Weiland. Discrete electromagnetics: Maxwell’s equations tailored to numerical simulations. 06 2001.
- [23] Md. Rashedul Islam, Mohammad Islam, Mohamed Soliman, Mohd Hafiz Baharuddin, Kamarulzaman Mat, Asraf M Moubark, and Sami Almalki. Metamaterial based on an inverse double v loaded complementary square split ring resonator for radar and wi-fi applications. *Scientific Reports*, 11, 11 2021.
- [24] G. Breit and E. Wigner. Capture of slow neutrons. *Phys. Rev.*, 49:519–531, Apr 1936.
- [25] G. Breit. The interpretation of resonances in nuclear reactions. *Phys. Rev.*, 58:506–537, Sep 1940.
- [26] Eugene P. Wigner. Resonance reactions and anomalous scattering. *Phys. Rev.*, 70:15–33, Jul 1946.
- [27] Ricardo Téllez Limón. Lentes de nano-rendijas. Tesis de maestría, CICESE, 2011.
- [28] A. Maradudin. Nota personal.
- [29] P. B. Johnson and R. W. Christy. Optical constants of the noble metals. *Phys. Rev. B*, 6:4370–4379, Dec 1972.
- [30] J. Brown and R. Churchill. *Complex Variables and Applications*. Brown and Churchill series. McGraw-Hill Education, 2009.
- [31] Sanjun Zhang, Lotfi Berguiga, Juan Elezgaray, Thibault Roland, Cendrine Faivre-Moskalenko, and Françoise Argoul. Surface plasmon resonance characterization of thermally evaporated thin gold films. *Surface Science*, 601(23):5445–5458, 2007.
- [32] Jun Fan, Wenzhe Wang, Haixin Wang, and Pu Jibin. Tribological performance and mechanism of mon/vn multilayer films with different modulation periods at different temperature. *Tribology Letters*, 69, 10 2021.
- [33] Yasser Fuentes, Jose Sánchez-Gil, Camilo Florian, Vincenzo Giannini, J. Solis, and Jan Siegel. Surface plasmon polaritons on rough metal surfaces: Role in the formation of laser-induced periodic surface structures. *ACS Omega*, 4:6939–6946, 04 2019.