



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

“Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez”

MODELADO DE LAS RESONANCIAS DEL PLASMÓN DE
SUPERFICIE EN UNA CONFIGURACIÓN DE KRETSCHMANN
MEDIANTE UN MÉTODO INTEGRAL

TESIS

Para obtener el grado de

LICENCIADO EN CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

PRESENTA:

ERIC DIDIER GALVÁN NAVARRO

ASESOR DE TESIS:

Dr. en Ciencias en Óptica
DR. HÉCTOR I. PÉREZ AGUILAR

CO-ASESOR DE TESIS:

Dr. en Ciencias en Óptica
DR. FRANCISCO VILLA VILLA

Morelia, Michoacán, Agosto de 2021

RESUMEN

La plasmónica es un área de investigación de gran desarrollo que se ocupa principalmente del estudio de los procesos de interacción de la luz y de los electrones de conducción en interfaces metal-dieléctrico. Esta manipulación de la luz está basada en las propiedades de los plasmones de superficie que son oscilaciones colectivas del gas de electrones en un metal. De esta manera, al acoplarse las ondas de luz con las oscilaciones electrónicas forman una nueva cuasipartícula llamada plasmón polaritón de superficie (SPP) que se propaga a través de la superficie de la estructura. En este trabajo se ha realizado un estudio teórico numérico de la propagación de la luz en diferentes sistemas de multicapas construidos con dieléctricos y metales. En particular, en el cálculo numérico de las resonancias del plasmón superficial (SPRs) mediante la configuración de Kretschmann. Para abordar el problema de interés, desarrollamos e implementamos dos técnicas numéricas. La primera se conoce como el método de la ecuación integral, en el que se puede considerar un modelo más realista. El segundo método es el de la matriz de transferencia, el cual considera interfaces infinitas plano paralelas siendo utilizado como método de referencia y comparación con los resultados obtenidos con el método integral dando una buena correspondencia entre ambos. Los resultados mostraron la excitación del SPP y que el comportamiento del ángulo de la SPR así como la discretización son muy importantes; ya que la ubicación de la SPR tiende a aparecer en un intervalo angular de 5 grados para longitudes de onda cortas hasta llegar a un intervalo menor a un grado para longitudes de onda largas. Una interesante aplicación de la técnica de la resonancia de los plasmones superficiales es en el campo de la biomedicina; por ejemplo, en el sensado de la temperatura de capas líquidas y concentraciones de glucosa. También los sistemas de capas dieléctricas tienen una gran variedad de aplicaciones en el área de interferometría, espectrometría, video, etc.

Palabras clave: Resonancia del plasmón superficial, Método de la Ecuación Integral, Películas delgadas, Método de la Matriz de Transferencia, Kretschmann.

ABSTRACT

Plasmonics is a highly developed research area that is mainly concerned with the study of the interaction processes of light and conduction electrons at metal-dielectric interfaces. This manipulation of light is based on the properties of surface plasmons which are collective oscillations of the electron gas in a metal. Thus, when light waves are coupled with electronic oscillations, they form a new quasiparticle called the surface plasmon polariton (SPP) that propagates through the surface of the structure. In this work, a numerical theoretical study of the propagation of light in different multilayer systems built with dielectrics and metals has been carried out. In particular, in the numerical calculation of surface plasmon resonances (SPRs) using the Kretschmann configuration. To study the problem of interest, we develop and implement two numerical techniques. The first is known as the integral equation method, in which a more realistic model can be considered. The second method is that of the transfer matrix which considers infinite parallel plane interfaces being used as a reference method and comparison with the results obtained with the integral method, giving a good correspondence between both. The results showed the excitation of the SPP and that the behavior of the angle of the SPR as well as the discretization are very important; since the location of the SPR tends to appear in an angular interval of 5 degrees for short wavelengths until reaching a less than one degree interval for long wavelengths. An interesting application of the surface plasmon resonance technique is in the field of biomedicine; for example, in sensing the temperature of liquid layers and glucose concentrations. Dielectric layer systems also have a great variety of applications in the area of interferometry, spectrometry, video, etc.

Keywords: Surface Plasmon Resonance, Integral Equation Method, Thin films, Transfer Matrix Method, Kretschmann.

Dedicatoria

A mis padres Manuel Galván M. y María Elena Navarro. G., por haberme dado el apoyo, cariño y comprensión a pesar de mis decisiones egoístas, educarme en valores y principios con los cuales ahora se rige mi vida.

A mi hermano José Manuel por apoyarme, protegerme y siempre estar ahí cuando lo necesito.

A mi abuelo Manuel Galván Sánchez, que siempre nos dio su apoyo y confió en nosotros. El tiempo no dejo que lo vivieras pero lo hemos logrado.

Agradecimientos

Le agradezco a mi asesor, el Dr. Héctor I. Pérez A., por sus consejos, apoyo, paciencia y el tiempo que me dedico durante el desarrollo de este trabajo. A mi coasesor, el Dr. Francisco Villa V., por sus comentarios y contribuciones que me permitieron enriquecer este trabajo.

A mis compañeros con los cuales mano a mano superamos el inicio tortuoso de la carrera y en él ahora nos preparamos para continuar al siguiente escalón de la vida.

A mis sinodales, Dr. Mauricio Ortiz G., Dr. Francisco J. Domínguez M., Gabriel Arroyo C., José G. Tinoco R., por darme su preciado tiempo para revisar y evaluar mi trabajo de tesis.

Contenido

	Página
Resumen	i
Abstract	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Contenido	v
Lista de Figuras	vii
I. INTRODUCCIÓN	1
I.1. Estructura de la tesis	5
II. Fundamentos Teóricos	7
II.1. Ecuaciones de Maxwell	8
II.2. Propagación de una onda EM en materiales conductores	10
II.2.1. Modelo de Lorentz-Drude	12
II.3. El vector de Poynting	16
II.4. Condiciones de Frontera	17
II.4.1. Polarización transversal eléctrica TE o s	21
II.4.2. Polarización transversal magnética TM o p	23
II.5. Coeficientes de Fresnel	24
II.5.1. Ángulo de Brewster	25
II.5.2. Condición del ángulo crítico	27
II.6. Método de la Matriz de Transferencia	27
II.7. Plasmones superficiales	32
III. EL MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL	39
III.1. Descripción del Método de la Ecuación Integral	39
III.1.1. Forma integral y discretización de la ecuación de Helmholtz	42
III.2. Sistema de multicapas de películas delgadas	44
III.2.1. Sistema de 2 películas delgadas	45
III.2.2. Sistema de 3 películas delgadas	47
III.2.3. Sistema de multicapas con i interfaces	49
III.3. El campo incidente	54
III.4. Potencia incidente	56
III.5. Potencia esparcida	59

Contenido (continuación)

	Página
III.6. Verificación del Método de la Ecuación Integral	60
III.6.1. Respuesta óptica de sistemas de multicapas dieléctricas de 1, 2 y 3 interfaces	60
III.6.2. Respuesta óptica de sistemas de multicapas metálicas de 1 y 2 interfaces	62
IV. RESULTADOS	64
IV.1. Película altamente reflejante	65
IV.2. Película antirreflejante	66
IV.3. Filtros de Borde	68
IV.3.1. Filtro pasa onda larga	68
IV.3.2. Filtro pasa onda corta	69
IV.4. Resonancia de Plasmón Superficial	70
IV.4.1. Casos particulares	70
IV.4.2. Variación del espesor de la película metálica	74
IV.4.3. Variación de la longitud de onda	75
V. Conclusiones	78
A. Programa para simular la propagación de una onda a través de un sistema de multicapas	82
REFERENCIAS	99

Lista de Figuras

Figura		Página
1	Esquema simplificado del funcionamiento de un dispositivo de resonancia de plasmones superficiales (detector de moléculas) Tomada de la Ref. [Vidal and Moreno (2008)].	4
2	Valores de la permitividad relativa de plata en su parte real ε_r y su parte imaginaria ε_i , obtenidos de los modelos de (a) Drude y de (b) Lorentz-Drude.	17
3	Diagrama de la interfaz y los campos EM.	18
4	Configuración geométrica de la superficie y de la onda EM incidente.	21
5	Orientación de los vectores EM con respecto al plano de incidencia para la polarización s.	22
6	Orientación de los vectores EM con respecto al plano de incidencia para la polarización p.	23
7	Reflectancia y transmitancia de una interfaz típica entre aire y vidrio con índices de refracción $n_{air} = 1.0$, $n_{vid} = 1.52$ respectivamente. a) y b) R y T cuando $n_1 < n_2$ (incidencia externa: desde el aire). c) y d) R y T cuando $n_1 > n_2$ (incidencia interna: desde el vidrio).	26
8	Campos eléctricos en una interfaz entre los medios n_i ($i = 1, 2, \dots, u, u + 1$).	29
9	Campos eléctricos en una interfaz entre los medios n_1 y n_2	30
10	Campos eléctricos en dos interfaces entre los medios n_1 , n_2 y n_3	31
11	Interfaz plana metal - dieléctrico.	33
12	Curvas de la relación de dispersión para un SP en un medio dieléctrico tomada de la Ref. Almog <i>et al.</i> (2011).	36
13	Plasmón superficial formado en una interfaz metal-dieléctrico.	37
14	Sistema de j películas de espesor d_q siendo $q = 1, 2, \dots, j$, rodeadas por un medio incidente y un medio de transmisión, con n_l siendo $l = 1, 2, \dots, j+2$, el índice de refracción de cada medio.	40

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página	
15	Sistema de j películas de espesor d_q siendo $q = 1, 2, \dots, j$, rodeadas por un medio incidente y un medio de transmisión, con n_l el índice de refracción de cada medio y su respectivo contorno denotado por Γ_l siendo $l = 1, 2, \dots, j + 2$	42
16	Sistema de 2 películas delgadas formadas con 3 interfaces siendo n_i y Γ_i ($i = 1, 2, 3, 4$), los índices de refracción y los contornos de las superficies, respectivamente.	45
17	Sistema de 3 películas delgadas formadas con 4 interfaces siendo n_i y Γ_i ($i = 1, 2, 3, 4, 5$), los índices de refracción y los contornos de las superficies, respectivamente.	48
18	Un sistema de multicapas de i interfaces siendo n_l y Γ_l ($l = 1, 2, 3, \dots, i + 1$), que representan los índices de refracción y los contornos de las superficies, respectivamente.	50
19	Un sistema de multicapas de i interfaces siendo n_l y Γ_l ($l = 1, 2, 3, \dots, i + 1$), que representan los índices de refracción y los contornos de las superficies, respectivamente.	52
20	Esquema de una sistema con una película de espesor d . La longitud del sistema en la dirección x es de L . El semi ancho del haz Gaussiano incidente es g . El ángulo incidente es θ_i , para la función de onda Ψ_i , y los ángulos de esparcimiento son θ_1 y θ_2 (para reflexión y transmisión) para las respectivas funciones de onda Ψ_1 y Ψ_2	55
21	Perfiles de tres sistemas formados por: (a) dos medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire) y $n_2 = 1.5$ (vidrio) separados por una interfaz de longitud $L = 10\pi \mu\text{m}$; (c) tres medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 1.5$ (vidrio) y $n_3 = 1.0$ (aire) con espesor de la capa de en medio $d = 2.0 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces de $L = 10\pi \mu\text{m}$; (e) cuatro medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 1.5$ (vidrio), $n_3 = 2.0$ (Zircón) y $n_4 = 1.5$ (vidrio) con espesores de las capas de $d = 4.0 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces $L = 10\pi \mu\text{m}$. (b), (d) y (f) Reflectancia (R) y transmitancia (T) obtenidas por los métodos numérico (IEM) y analítico (TMM) de los 3 sistemas de multicapas con medios dieléctricos para las polarizaciones s y p. Los 3 sistemas están iluminados con un haz Gaussiano de longitud de onda $\lambda = 1.0 \mu\text{m}$	61

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página	
22	Perfiles de dos sistemas de multicapas formados de la siguiente forma: (a) dos medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire) y $n_2 = 0.14374 + 3.8097i$ (plata) separados por una interfaz de longitud $L = 12\pi \mu\text{m}$; (c) tres medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 0.14374 + 3.8097i$ (plata) y $n_3 = 1.0$ (aire) con espesor de la capa de en medio $d = 0.01 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces de $L = 12\pi \mu\text{m}$. (b) y (d) Reflectancia (R) y transmitancia (T) obtenidas por los métodos numérico (IEM) y analítico (TMM) de los 2 sistemas de multicapas con medios dieléctricos para las polarizaciones s y p. Ambos sistemas iluminados con un haz Gaussiano de longitud de onda de $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$	63
23	(a) Perfil de un sistema de películas delgadas con índices de refracción $n_1 = 1.0$, $n_H = 2.1$, $n_L = 1.38$ y $n_s = 1.52$ con espesores de $d_H = 0.0655 \mu\text{m}$ y $d_L = 0.0996 \mu\text{m}$. Reflectancia (R) y transmitancia (T) para las polarizaciones (b) s y (c) p variando la longitud de onda $\lambda \in [0.3, 0.8] \mu\text{m}$, a un ángulo de incidencia $\theta_i = 30$ usando el IEM (numérico con líneas discontinuas) y el TMM (analítico con líneas continuas).	65
24	Perfil para un sistema de 3 capas cuyas interfaces separan los medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$, $n_2 = 1.38$, $n_3 = 1.585$, $n_4 = 1.82$ y $n_s = 1.52$ con espesores de las capas (a) $d_j = 0.1767 \mu\text{m}$ ($j = 1, 2, 3$) y (c) $d_j = 0.1414 \mu\text{m}$ ($j = 1, 2, 3$). Reflectancia (R) y transmitancia (T) obtenidas con el IEM (numérico con líneas discontinuas) y el TMM (analítico con líneas continuas), variando la longitud de onda $\lambda \in [0.44, 1.34] \mu\text{m}$, (b) a un ángulo incidente $\theta_i = 0$ para la polarización s y (d) a un ángulo incidente $\theta_i = 59$ para la polarización p.	67
25	Perfil para un sistema de 11 capas con interfaces que separan los medios con índices de refracción $n_1 = 1.52$, $n_H = 2.35$, $n_L = 1.35$ y $n_s = 1.0$, y espesores de las películas delgadas de (a) $d = 0.186 \mu\text{m}$ y (c) $d = 0.112 \mu\text{m}$. Reflectancia (R) y transmitancia (T) usando el IEM (numérico con líneas discontinuas) y TMM (analítico con líneas continuas) para (b) un filtro pasa onda larga y (d) un filtro pasa onda corta variando la longitud de onda.	69

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página
26 (a) Perfil de un sistema de Kretschmann compuesto por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 0.14374 + 3.8097i$ (plata) y $n_3 = 1.0$ y espesor de la película metálica $d = 0.04 \mu\text{m}$. (b) Reflectancia de la configuración de Kretschmann mediante los métodos numérico (IEM línea discontinua) y analítico (TMM línea continua) como función del ángulo de incidencia.	71
27 (a) Perfil de un sistema de Kretschmann compuesto por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 0.1726 + 3.4218i$ (oro) y $n_3 = 1.0$ y espesor de la película metálica $d = 0.05 \mu\text{m}$. (b) Reflectancia de la configuración de Kretschmann mediante los métodos numérico (IEM línea discontinua) y analítico (TMM línea continua) como función del ángulo de incidencia.	72
28 (a) Perfil de un sistema de Kretschmann compuesto por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 1.3406 + 7.3015i$ (aluminio) y $n_3 = 1.0$ y espesor de la película metálica $d = 0.01 \mu\text{m}$. (b) Reflectancia de la configuración de Kretschmann mediante los métodos numérico (IEM línea discontinua) y analítico (TMM línea continua) como función del ángulo de incidencia.	73
29 Reflectancia obtenida por los métodos (a) numérico (IEM) y (b) analítico (TMM) para un sistema de Kretschmann formado por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 0.1726 + 3.4218i$ (oro) y $n_3 = 1.0$ con una longitud de onda fija $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia y el espesor de la película metálica.	75
30 Reflectancia obtenida por los métodos (a) numérico (IEM) y (b) analítico (TMM) para un sistema de Kretschmann formado por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2(\lambda)$ (plata) y $n_3 = 1.0$ con un espesor de la película metálica fijo $d = 0.04 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia y la longitud de onda.	76

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

Dadas las propiedades ópticas de los materiales expresadas mediante la función dieléctrica y la conductividad en las ecuaciones de Maxwell de la interacción de la luz (ondas electromagnéticas) con la materia, la respuesta óptica de un sistema compuesto de diferentes materiales y una geometría dada en el espacio, se puede determinar mediante las cantidades observables definidas por la reflexión, la transmisión y la absorción. Particularmente, cuando se da esta interacción con los metales existen efectos que involucran un campo de estudio de la física conocido como plasmónica. Este campo se encarga de estudiar las oscilaciones del plasma como resultado del acoplamiento de la luz con los electrones de un metal, particularmente aquellos localizados en la superficie del mismo.

Los metales además de reflejar la luz, tienen una propiedad óptica peculiar que bajo ciertas condiciones la luz puede excitar grupos de cargas eléctricas que se comportan como partículas llamadas plasmones de superficie (SPs¹). Estas oscilaciones colectivas están altamente confinadas a la superficie. Ésta es una propiedad interesante, ya que regularmente la luz viaja por el espacio y no se le confina con facilidad.

Los plasmones de superficie son modos electromagnéticos que se pueden determinar

¹Por sus siglas en inglés, Surface Plasmons.

mediante las ecuaciones de Maxwell. También se pueden determinar soluciones de la ecuación de Laplace para un potencial escalar que se propagan de una manera ondulatoria a lo largo de una interfaz dieléctrica-metal plana, y cuya amplitud disminuyen exponencialmente con la distancia en la dirección normal a la interfaz en cada medio (Maradudin *et al.*, 2005). Los plasmones de superficie son básicamente cuantos de oscilaciones de plasma en una superficie metálica. Cuando un plasmón de superficie se acopla con un fotón, se forma una cuasipartícula llamada plasmón polaritón de superficie (SPP²) y se produce la resonancia de plasmones superficiales (SPR³) (Bera and Ray, 2009).

Una fracción de la energía de luz incidente en un estrecho intervalo angular definido puede interactuar con los electrones de la película metálica (plasmón), dicha interacción reduce la intensidad de la luz reflejada. El ángulo de incidencia apropiado en el cual esto ocurre depende de varios factores. Los factores que influyen en el ángulo al cual aparece el plasmón son: el grosor de la capa metálica en sí y el índice de refracción del material en contacto con su superficie contigua. Dado que la posición angular del plasmón es altamente sensible a cambios en el índice de refracción del medio de contacto en la superficie donde éste se excita, se utiliza como sensor de reacciones químicas (Ramírez, 2005). Actualmente esta técnica de sensado es una aplicación importante de los plasmones de superficie.

Los efectos debidos a la presencia de plasmones de superficie han sido observados desde tiempos muy remotos desde la edad de bronce (siglo XII A.C.) con la fabricación de vidrios con coloración azulada debido al contenido de nanopartículas de cobre. En 1908, Gustav Mie desarrolló su teoría de esparcimiento de la luz en partículas esféricas (Mie, 1908). Después de 1908, los estudios con respecto al plasmón superficial quedaron

²Por sus siglas en inglés, Surface Plasmon Polariton.

³Por sus siglas en inglés, Surface Plasmon Resonance.

detenidos por casi 50 años hasta que David Pines en 1956, describió teóricamente las características de la pérdida de energía que experimentaban los electrones libres en una superficie metálica y él atribuye estas pérdidas a oscilaciones colectivas de electrones libres en el metal. Pines llama a estas oscilaciones: plasmones (Pines, 1956). Esta es la primera vez que se utiliza el nombre de plasmones para describir este tipo de campo eléctrico propagándose sobre una superficie. Ese mismo año Robert Fano introduce el término de polaritón para oscilaciones acopladas vinculadas a electrones (Fano, 1956). El SPP se basa en procesos de interacción entre la radiación electromagnética y los electrones de conducción en interfaces metálicas o en pequeñas nanoestructuras metálicas, permitiendo aplicaciones de la óptica en dimensiones sub-longitud de onda. Un año después Rufus Ritchie junto a otros describen el comportamiento anómalo en rejillas en términos de plasmones superficiales excitados (Ritchie, 1957).

En 1968 Andreas Otto, Erich Kretschmann y Heinz Raether presentan métodos para la excitación óptica de plasmones superficiales, experimentalmente (Otto, 1968; Kretschmann and Raether, 1968). Con la configuración de Kretschmann se le han dado varias aplicaciones a las SPRs; como ejemplo, los sensores moleculares que debido al alto confinamiento en la superficie del metal los SPs estos modos EM se muestran muy sensibles a la presencia de moléculas adsorbidas en la superficie (ver Fig. 1) (Vidal and Moreno, 2008). Estos sensores tienen como objetivo detectar la presencia de moléculas en una región de unos pocos nanómetros en la dirección normal a la superficie y sus propiedades. La configuración de Kretschmann como se muestra en la Fig. 1, se compone de un sustrato (medio incidente) sobre el cual se deposita la película metálica que tiene como medio de transmisión el aire o alguna sustancia dieléctrica.

Las películas delgadas metálicas tienen una gran cantidad de aplicaciones aparte de las SPRs. Se utilizaron inicialmente con fines decorativos. En el siglo XVII, los artistas

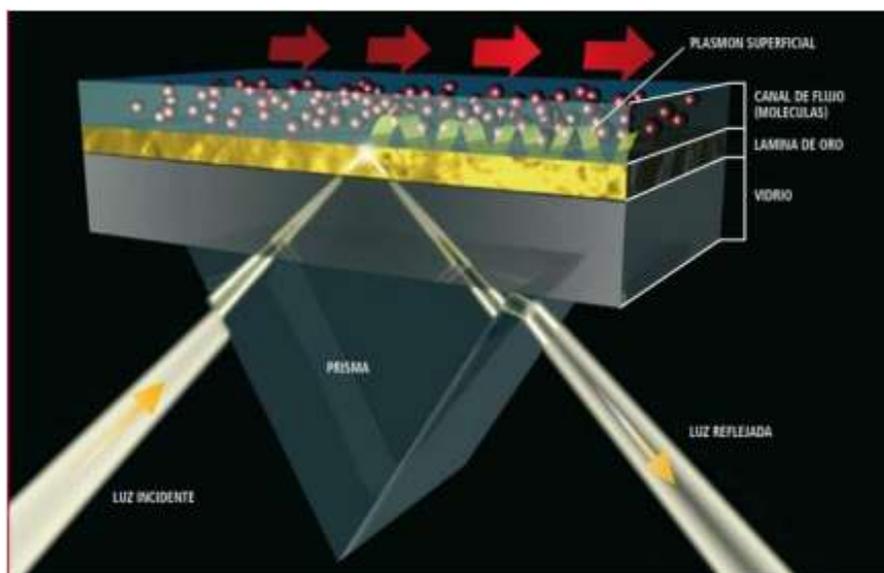


Figura 1. Esquema simplificado del funcionamiento de un dispositivo de resonancia de plasmones superficiales (detector de moléculas) Tomada de la Ref. [Vidal and Moreno (2008)].

aprendieron a pintar un patrón en un objeto cerámico con una disolución de una sal de plata. Primero se calentaba el objeto para causar la descomposición de la sal y así depositar una película delgada de plata (Brown *et al.*, 2004). El campo de estudio de las películas delgadas se considera hoy una ciencia debido a muchos de los adelantos en el desarrollo de instrumentación. Estas películas se pueden componer de diferentes materiales, que dependiendo de su aplicación las capas delgadas requieren tener ciertas propiedades físicas y químicas. Las películas delgadas se usan en microelectrónica como conductores, resistores, condensadores. También se usan como recubrimientos ópticos en lentes para modificar la cantidad de luz reflejada en sus superficies. Se depositan por diversas técnicas, que incluyen depósito al vacío, depósito iónico como Sputtering y depósito de vapor químico (Behrisch, 1981; Dobkin and Zuraw, 2003).

Los problemas físicos previamente mencionados también han sido estudiados por técnicas numéricas. Por ejemplo, el estudio de la propagación de la luz se basa en

métodos numéricos, como el Método de la Ecuación Integral (IEM⁴) (Mendoza *et al.*, 2006) que estamos considerando en este trabajo, presenta algunas ventajas en comparación con otros métodos, ya que tiene la capacidad de estudiar diferentes aspectos de estos sistemas que tienen geometrías complicadas. Como veremos, el formalismo propuesto ha sido considerado como una alternativa a los métodos existentes en el sentido de que da buenos resultados. Además para tener un punto de comparación con los resultados obtenidos también se tomará en cuenta una técnica analítica muy usada que se le conoce como el Método de la Matriz de Transferencia (TMM⁵).

I.1. Estructura de la tesis

La estructura de la tesis está organizada de la siguiente manera:

En el capítulo II se habla de algunos fundamentos teóricos de las ondas EM descritas en base a las ecuaciones de Maxwell. Tenemos la teoría de la propagación de la luz en materiales conductores y como complemento a esto consideramos el modelo de Lorentz-Drude, el cual nos ayuda a entender el comportamiento de la luz en medios metálicos. Se desarrollaron brevemente las condiciones de frontera entre dos medios, así como también, los coeficientes de Fresnel, con los cuales nos es posible calcular la reflectancia y transmitancia en los medios de incidencia y de transmisión, respectivamente. Además, se da una explicación general del TMM con el cual podemos obtener analíticamente la respuesta óptica de sistemas cuya estructura es diseñada para observar la presencia de plasmones de superficie. Por último, desarrollamos la teoría para determinar la relación de dispersión de los plasmones de superficie.

En el capítulo III se describe de manera detallada el Método de la Ecuación Integral,

⁴Por sus siglas en inglés, Integral Equation Method.

⁵Por sus siglas en inglés, Transfer Matrix Method.

así como las ecuaciones necesarias para su generalización para sistemas de j - películas delgadas, que se puede aplicar tanto a los recubrimientos de múltiples capas y filtros dieléctricos; así como también a los plasmones superficiales. Para entender el comportamiento de estos sistemas calcularemos la reflectancia y transmitancia dadas por los campos esparcidos. Por último, se comparan los resultados del IEM con sistemas de multicapas con películas dieléctricas y metálicas con aquellos obtenidos por TMM.

En el capítulo IV se muestran los resultados obtenidos primeramente para diferentes tipos de sistemas de películas delgadas dieléctricas a partir del TMM y el IEM para ambas polarizaciones s y p. Por último, se analizará la respuesta óptica de la configuración de Kretschmann para diferentes tipos de metales, en los cuales se encuentra el ángulo de las SPRs. Así como dos casos generales en los cuales se considerarán variaciones con el espesor de las películas metálicas y la longitud de onda incidente.

Finalmente, en el capítulo V se presentan las conclusiones principales de este trabajo.

Capítulo II

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

En este capítulo se presentan algunos fundamentos teóricos de las ondas EM descritas con las ecuaciones de Maxwell, con las cuales podemos encontrar la ecuación de Helmholtz aplicada a los campos eléctrico y magnético. La función dieléctrica determina como se propaga la luz en un metal, la cual básicamente penetra una pequeña distancia característica llamada profundidad de piel del material y decae con una envolvente exponencial convirtiendo parte de la energía de la onda electromagnética en calor. Además, para comprender las propiedades de los metales revisaremos el modelo de Lorentz-Drude con el que es posible derivar la función dieléctrica que determina su comportamiento como función de la frecuencia de la luz incidente. Por otro lado, se estudian las condiciones de frontera, así como también, los coeficientes de Fresnel, con los cuales es posible calcular la reflectancia y transmitancia. En base a esto desarrollamos el TMM con el cual se puede estudiar la propagación de la luz en sistemas estratificados. Y por último los efectos al iluminar una película metálica mediante una onda evanescente para poder excitar los plasmones superficiales.

II.1. Ecuaciones de Maxwell

La existencia de las ondas electromagnéticas (EM) y su interacción con sistemas compuestos de diferentes materiales se puede derivar de la teoría electromagnética, la cual es formulada por cuatro ecuaciones que representan los fenómenos eléctricos y magnéticos que fueron descubiertos por Coulomb, Faraday y Ampere, y complementados y formulados como una teoría por Maxwell:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (4)$$

En estas ecuaciones \mathbf{E} representa el vector eléctrico, \mathbf{H} el vector magnético, \mathbf{B} la inducción magnética, y \mathbf{D} el desplazamiento eléctrico. Las propiedades magnéticas de los materiales y el vacío se dan a través de la permeabilidad magnética μ que puede considerarse constante a frecuencias ópticas, por lo que podemos denotar de manera equivalente $\mu = \mu_0$. En particular ρ representa la distribución de carga en un espacio 3D, y \mathbf{J} una densidad de corriente que puede ser función del espacio también, aunque no se indica explícitamente. A pesar de que no hay cargas o corrientes presentes $\rho = 0$, $\mathbf{J} = 0$, los campos EM se pueden generar mediante campos variables en el tiempo o se pueden sostener como ondas EM en el vacío y materiales.

Cuando consideramos materiales lineales, las ecuaciones constitutivas relacionan los campos a través de las propiedades de los materiales,

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad (5)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (6)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (7)$$

donde ε es la permitividad eléctrica y que en el vacío también se llama constante dieléctrica denotada por ε_0 . Pero para los materiales se denomina función dieléctrica debido a su dependencia con la frecuencia y posición.

Cabe mencionar que a pesar de que ε se considera generalmente como una función real para los dieléctricos, puede tener una pequeña parte imaginaria cuando nos acercamos a una región de resonancia. Por otro lado, para considerar explícitamente las propiedades de un metal a través de la conductividad σ , es posible tener en cuenta este parámetro a través de una parte imaginaria en la función dieléctrica para tener en cuenta la conductividad.

Asumiendo que $\rho = 0$ y $\mathbf{J} = 0$, si aplicamos el rotacional a la Ec. (3) con la identidad vectorial $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E}$, y utilizando las Ecs. (1), (4) y (5), obtenemos la ecuación de onda para el campo eléctrico,

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (8)$$

siendo $\mu\varepsilon = 1/v^2$, con v la velocidad de la luz dentro del medio. De manera similar obtenemos la ecuación del campo magnético,

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = 0. \quad (9)$$

Tomando en cuenta una dependencia armónica del tiempo $e^{-i\omega t}$ para los campos electromagnéticos,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}, \quad (10)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}, \quad (11)$$

entonces las ecuaciones de onda (Ecs. (8) y (9)) adquieren la forma:

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \quad (12)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0, \quad (13)$$

siendo las ecuaciones de Helmholtz, donde la magnitud del vector de propagación de la onda \mathbf{k} es

$$k = \frac{\omega}{v} = \frac{\omega}{c}n,$$

donde $n = c/v$ es el índice de refracción del medio. Esta relación entre ω y k constituye una relación de dispersión para un medio homogéneo.

Se puede demostrar aplicando la técnica de separación variable que la solución de onda plana a la ecuación de Helmholtz será:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (14)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (15)$$

donde \mathbf{E}_0 y \mathbf{H}_0 son vectores constantes, y \mathbf{r} es el vector de posición. De esta manera, la solución espacio-temporal de la onda plana se puede expresar como:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (16)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (17)$$

Así, para campos armónicos las ecuaciones de Ampere y Faraday se escriben como:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H}, \quad (18)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon\mathbf{E}. \quad (19)$$

II.2. Propagación de una onda EM en materiales conductores

Para desarrollar la teoría de la propagación de una onda EM en un material conductor, es necesario considerar el caso en el que $\mathbf{J} \neq \mathbf{0}$ en las ecuaciones de Maxwell; es decir, que

existe una densidad de corriente. De esta manera, si utilizamos el modelo de Lorentz para considerar este efecto, necesitamos resolver la ecuación de movimiento del electrón libre sujeto a un campo oscilante armónico. La ecuación de movimiento del electrón en términos de su velocidad \mathbf{v} es:

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} + m\frac{\mathbf{v}}{\tau} = e\mathbf{E}, \quad (20)$$

donde τ es el tiempo libre medio entre colisiones, las que representan un amortiguamiento. La corriente que fluirá debido a la perturbación del campo es $\mathbf{J} = Ne\mathbf{v}$ y la ecuación de movimiento para la corriente es entonces

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} + \frac{1}{\tau}\mathbf{J} = \frac{Ne^2\mathbf{E}}{m}, \quad (21)$$

donde ahora la constante τ representa al tiempo de relajación de la corriente. Si aplicamos un campo impulsivo ($\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0\delta(t)$), la solución a la Ec. (21) será una exponencial decreciente con τ la constante de decaimiento.

Para un campo estático, la solución a la Ec. (21) es simplemente $\mathbf{J} = Ne^2\tau/m\mathbf{E}$, lo que podemos escribir como la Ec. (7) con $\sigma = Ne^2\tau/m$ la conductividad estática. En el caso dinámico, con un campo oscilando a frecuencia ω , $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0e^{-i\omega t}$ la solución será

$$\mathbf{J} = \frac{\sigma}{1 - i\omega\tau}\mathbf{E}. \quad (22)$$

Ahora, usando la Ec. (22) en la Ec. (21) se llega a la siguiente ecuación de onda,

$$\nabla^2\mathbf{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{\mu_0\sigma}{1 - i\omega\tau}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}. \quad (23)$$

Proponiendo una solución a esta ecuación de la forma $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_0e^{i(Kz - \omega t)}$, se tiene la siguiente condición:

$$K^2 = \frac{\omega^2}{c^2} + i\frac{\mu_0\sigma\omega}{1 - i\omega\tau}. \quad (24)$$

Ésta es la relación de dispersión para el conductor real. Para examinar sus consecuencias, hagamos una simplificación considerando $\omega\tau \simeq 0$. Puesto que $\tau \sim 10^{-13}$ s para

muchos metales, ésta es una buena aproximación para frecuencias de hasta 10^{12} Hz.

Con esto,

$$K^2 \simeq k^2 + i\mu_0\sigma\omega = k^2 \left(1 + \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0} \right), \quad (25)$$

donde hicimos $k = \omega/c$. Lo que nos lleva a que

$$K \simeq k \sqrt{\left(1 + \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0} \right)},$$

y si $\omega\varepsilon_0 \ll \sigma$, tenemos que

$$K \simeq k(1 + i) \sqrt{\frac{\sigma}{2\omega\varepsilon_0}}. \quad (26)$$

Para ver como influye esta relación de dispersión en la propagación de una onda en un metal, sustituyamos esta expresión aproximada para K en la solución a la ecuación de onda,

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-k\sqrt{\frac{\sigma}{2\omega\varepsilon_0}}z} e^{i(k\sqrt{\frac{\sigma}{2\omega\varepsilon_0}}z - \omega t)}, \quad (27)$$

que se puede reescribir como

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-z/\delta} e^{i(z/\delta - \omega t)}, \quad (28)$$

la cual es una onda evanescente.

La exponencial real representa una atenuación de la onda al propagarse en el medio conductor. Por lo que la distancia de penetración de la onda (skin depth) está definida como

$$\delta = \sqrt{\frac{2\omega\varepsilon_0}{\sigma}}$$

y es en general extremadamente pequeña del orden de 10^{-7} m, para un amplio intervalo de longitudes de onda.

II.2.1. Modelo de Lorentz-Drude

Para estudiar las propiedades ópticas de los metales se requiere un modelo de plasma, o gas de electrones libres de densidad numérica N que se mueve contra un fondo fijo

de núcleos de iones positivos. Esta técnica se le conoce como modelo de Drude (Drude, 1900). En 1900, Paul Drude propuso un modelo para la conducción eléctrica, como el resultado de aplicar la teoría cinética de electrones en un sólido; ya que en los metales los electrones no están unidos a los núcleos. Entonces este modelo considera a los electrones de conducción de un metal como un gas homogéneo de electrones inmerso en un potencial positivo uniforme impuesto por los iones inmóviles de la red cristalina.

Lo interesante es que este modelo aparentemente simple permite predecir de manera bastante aceptable la conductividad eléctrica y térmica de los metales en cierto rango de longitudes de onda. Este modelo no da buenos resultados en el infrarrojo y el visible, por lo que posteriormente Lorentz realizó una modificación en lo que se conoce como el modelo de Lorentz-Drude. En este modelo es necesario considerar que el medio está constituido por átomos cuyos electrones están ligados armónicamente a los núcleos y cuyo movimiento es forzado por el campo eléctrico de la onda. Como veremos el modelo de Drude es un caso simple del modelo de Lorentz-Drude; es decir, el modelo de Lorentz-Drude lo que hace es tomar en cuenta más detalles al momento de calcular las permitividades relativas (Benavides *et al.*, 2016).

Haciendo uso del modelo de Lorentz para un átomo,

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega_0^2\right) \mathbf{x}(t) = \frac{e}{m} f \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (29)$$

tenemos que f es el factor de intensidad de la oscilación, ω_0 la frecuencia natural de oscilación, e la carga eléctrica y m la masa del electrón.

Además, el modelo del oscilador armónico considera que la energía de oscilación del electrón se pierde o es disipada gradualmente hasta que éste regresa a su estado relajado y es representado como una fuerza de amortiguamiento igual al producto de la constante del resorte y la velocidad del oscilador, que puede ser escrita como

$$\gamma \mathbf{v} = \gamma \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \gamma \mathbf{x}'. \quad (30)$$

Si sustituimos la Ec. (30) en la Ec. (29) obtenemos la ecuación amortiguada del modelo de Lorentz,

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \gamma\frac{d}{dt} + \omega_0^2\right)\mathbf{x}(t) = \frac{e}{m}f\mathbf{E}(\mathbf{r},t). \quad (31)$$

Si el desplazamiento $\mathbf{x}(t)$ es armónico en el tiempo con la misma frecuencia del campo eléctrico aplicado, $\mathbf{x}(t) = \mathbf{A}e^{i\omega t}$ y colocando \mathbf{r} en el origen del campo eléctrico aplicado, $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_0e^{i\omega t}$, entonces obtenemos que

$$\mathbf{A} = \frac{\frac{e}{m}f\mathbf{E}_0}{(\omega_0^2 + i\gamma\omega - \omega^2)}. \quad (32)$$

Ahora si sustituimos el valor de \mathbf{A} en $\mathbf{x}(t)$ llegamos a que

$$\mathbf{x}(t) = \frac{\frac{e}{m}fe^{i\omega t}}{(\omega_0^2 + i\gamma\omega - \omega^2)}\mathbf{E}_0. \quad (33)$$

Así la densidad de polarización inducida $\mathbf{P} = N\mathbf{e}\mathbf{x}(t)$ por unidad de volumen que contiene N átomos en términos del vector $\mathbf{x}(t)$ es

$$\mathbf{P} = \frac{N\frac{e^2}{m}fe^{i\omega t}}{(\omega_0^2 + i\gamma\omega - \omega^2)}\mathbf{E}_0, \quad (34)$$

y haciendo un cambio de variable

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m}, \quad (35)$$

donde ω_p es la frecuencia del plasma, la Ec. (34) se reescribe como

$$\mathbf{P} = \frac{f\omega_p^2}{(\omega_0^2 + i\gamma\omega - \omega^2)}\varepsilon_0\mathbf{E}. \quad (36)$$

Ahora, teniendo que

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0\chi\mathbf{E}, \quad (37)$$

y

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (38)$$

siendo χ la susceptibilidad eléctrica, el vector de desplazamiento se puede reescribir como

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0(1 + \chi)\mathbf{E}. \quad (39)$$

Tomando en cuenta que ε_r es conocida como la permitividad relativa y cumple que

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = \frac{\varepsilon\mu}{\varepsilon_0\mu_0} = \frac{c}{v} = n^2 = 1 + \chi, \quad (40)$$

donde c y v son las velocidades de la luz en el vacío y en un medio particular, respectivamente. Así, la Ec. (39) se puede reescribir como la Ec. (5), donde $\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_r$.

Ahora comparando las Ecs. (36) y (37) tenemos que

$$\chi(\omega) = \frac{f\omega_p^2}{(\omega_0^2 + i\gamma\omega - \omega^2)}. \quad (41)$$

Por lo tanto la permitividad relativa en términos de ω es

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{f\omega_p^2}{(\omega_0^2 + i\gamma\omega - \omega^2)}, \quad (42)$$

que es la función dieléctrica de Lorentz.

Si tenemos un j -ésimo oscilador en el volumen, entonces la función dieléctrica se reescribe como

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \sum_{k=n}^N \frac{f_k\omega_p^2}{(\omega_{0,k}^2 + i\gamma_k\omega - \omega^2)}. \quad (43)$$

En el modelo de Drude, el material se puede representar como un gas de electrones libres.

El modelo predice de buena manera las propiedades ópticas de los metales, y es usado para modelar parámetros tales como absorción y conductividad debido a transiciones electrónicas, donde la frecuencia de oscilación es cero; es decir, la constante de fuerza K_s es cero. Por lo tanto, si

$$\omega_0^2 = \frac{K_s}{m} \Big|_{K_s=0} \rightarrow \omega_0 = 0. \quad (44)$$

Ahora cambiando la variable

$$\Omega_p = \sqrt{f}\omega_p, \quad (45)$$

donde Ω_p es la frecuencia de plasma asociada con las transiciones intrabanda, el modelo de Drude para las propiedades dieléctricas de los metales es expresada como

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (46)$$

Para el modelo de Lorentz-Drude, la función dieléctrica considera la contribución de ambos electrones libres y electrones unidos a iones, y es expresado como

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_{r,\infty} + \sum_{k=0}^K \frac{f_k \omega_p^2}{(\omega_{0,k}^2 + i\gamma_k \omega - \omega^2)}, \quad (47)$$

donde $\varepsilon_{r,\infty}$ es la constante óptica dieléctrica a frecuencia infinita y K depende del número de electrones unidos a iones. Si $k = 0$ y $\omega_0 = 0$, esto representa el modelo de Drude. Pero si $k > 0$ y $\omega_0 > 0$, entonces ésta corresponde al modelo de Lorentz.

En la Fig. 2 tenemos los valores que se obtienen para la permitividad relativa correspondiente a la plata siguiendo los modelos de Drude (Fig. 2(a)) y Lorentz-Drude (Fig. 2(b)), en donde podemos observar claramente que hay una gran diferencia en el intervalo de longitudes de onda elegido, debido a las diferentes consideraciones anteriormente mencionadas entre los modelos.

II.3. El vector de Poynting

Las ondas EM pueden transportar energía. El flujo instantáneo de energía a través de una unidad de área está dado por el vector de Poynting \mathbf{S} , que proporciona la dirección y la magnitud del flujo de energía por unidad de tiempo. Empleando notación compleja, se tiene que

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}^*. \quad (48)$$

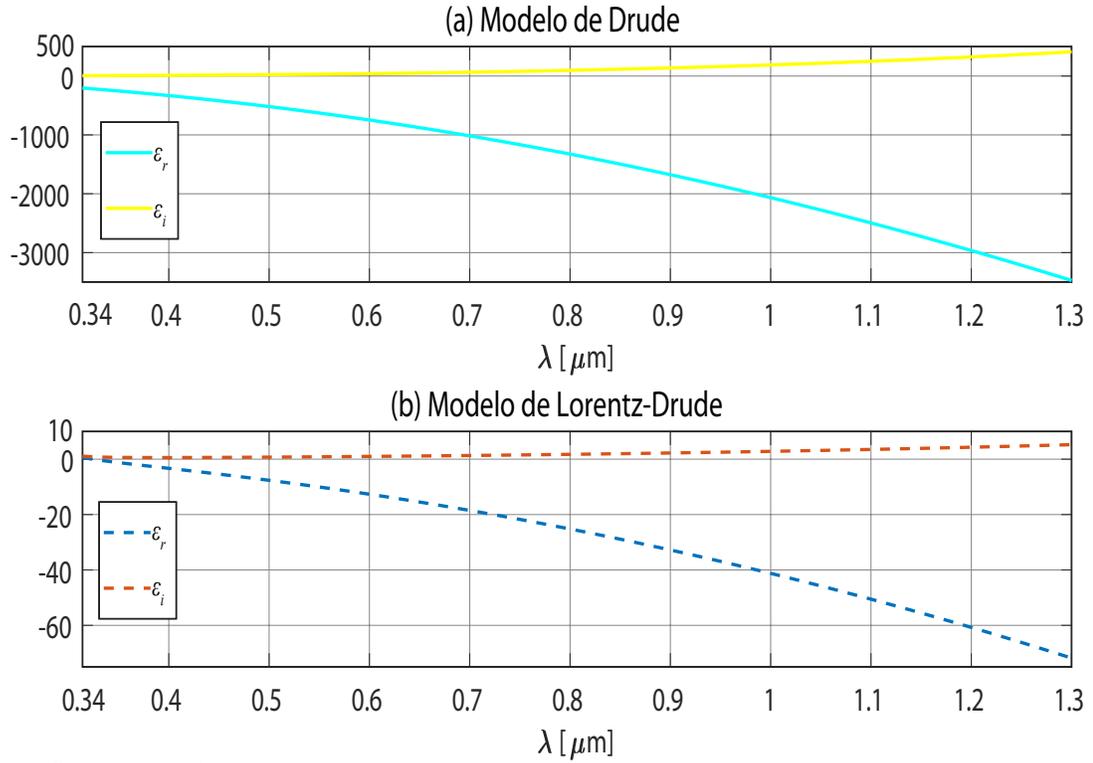


Figura 2. Valores de la permitividad relativa de plata en su parte real ϵ_r y su parte imaginaria ϵ_i , obtenidos de los modelos de (a) Drude y de (b) Lorentz-Drude.

El valor promedio en el tiempo del vector de Poynting está relacionado con la intensidad de la onda, que es una cantidad observable definida como

$$\mathbf{I} = \langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*), \quad (49)$$

cuya magnitud es

$$I = \frac{1}{2} \text{Re}(E H^*). \quad (50)$$

II.4. Condiciones de Frontera

Aunque las condiciones de contorno se pueden establecer en general para superficies en el espacio tridimensional, nos interesará aplicar estas condiciones principalmente a sistemas bidimensionales.

Las condiciones de frontera sobre los componentes tangenciales de los campos EM establecen que son continuas a través de la frontera entre dos medios,

$$(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0, \quad (51)$$

$$(\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0, \quad (52)$$

$$(\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \cdot \hat{\mathbf{t}} = 0, \quad (53)$$

$$(\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) \cdot \hat{\mathbf{t}} = 0. \quad (54)$$

En estas relaciones $\hat{\mathbf{t}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$ son los vectores unitarios tangente y normal, respectivamente, en cualquier punto de la superficie y los subíndices se utilizan para distinguir los campos en ambos medios como se indica en la Fig. 3. Una vez que se conoce el vector unitario normal $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{e}}_x n_x + \hat{\mathbf{e}}_y n_y$, el vector tangente $\hat{\mathbf{t}}$ mantiene una simple relación con $\hat{\mathbf{n}}$,

$$\hat{\mathbf{t}} = -\hat{\mathbf{e}}_x n_y + \hat{\mathbf{e}}_y n_x. \quad (55)$$

A estas alturas estamos asumiendo que nuestro sistema es bidimensional, pero esta

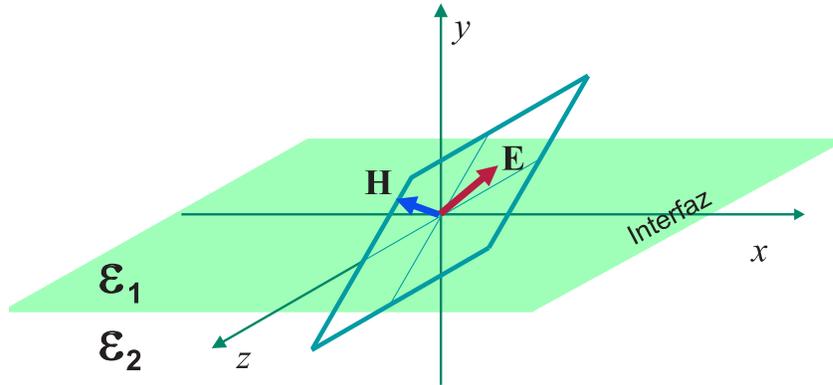


Figura 3. Diagrama de la interfaz y los campos EM.

situación cambiará en consecuencia cuando se consideren geometrías más complejas.

También nos interesa determinar las condiciones de contorno de las derivadas normales de los campos $\partial\mathbf{E}/\partial n$, $\partial\mathbf{H}/\partial n$. Por simplicidad, ahora estamos interesados en sistemas bidimensionales donde los campos son independientes de la coordenada z . En

tal caso, es posible separar los componentes de los campos EM en dos polarizaciones diferentes.

Este hecho se hace evidente si escribimos las ecuaciones de Faraday y Ampere para campos armónicos por componentes. Entonces empezamos desarrollando la Ec. (18) en términos de las componentes de los campos eléctrico y magnético,

$$\nabla \times \mathbf{E} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = i\omega\mu_0(\hat{\mathbf{e}}_x H_x + \hat{\mathbf{e}}_y H_y + \hat{\mathbf{e}}_z H_z), \quad (56)$$

se obtiene

$$\begin{aligned} & \hat{\mathbf{e}}_x \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) - \hat{\mathbf{e}}_y \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) + \hat{\mathbf{e}}_z \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \\ &= i\omega\mu_0(\hat{\mathbf{e}}_x H_x + \hat{\mathbf{e}}_y H_y + \hat{\mathbf{e}}_z H_z). \end{aligned} \quad (57)$$

Ahora desarrollando la Ec. (19) se tiene que

$$\nabla \times \mathbf{H} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_x & \hat{\mathbf{e}}_y & \hat{\mathbf{e}}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ H_x & H_y & H_z \end{vmatrix} = -i\omega\varepsilon(\hat{\mathbf{e}}_x E_x + \hat{\mathbf{e}}_y E_y + \hat{\mathbf{e}}_z E_z), \quad (58)$$

y se llega a

$$\begin{aligned} & \hat{\mathbf{e}}_x \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) - \hat{\mathbf{e}}_y \left(\frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial z} \right) + \hat{\mathbf{e}}_z \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \\ &= -i\omega\varepsilon(\hat{\mathbf{e}}_x E_x + \hat{\mathbf{e}}_y E_y + \hat{\mathbf{e}}_z E_z). \end{aligned} \quad (59)$$

Comparando cada una de las componentes de los campos, obtenemos las siguientes

expresiones:

$$H_x = \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right), \quad (60)$$

$$H_y = \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right), \quad (61)$$

$$H_z = \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right), \quad (62)$$

$$E_x = \frac{1}{-i\omega\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (63)$$

$$E_y = \frac{1}{-i\omega\varepsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (64)$$

$$E_z = \frac{1}{-i\omega\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right). \quad (65)$$

Si aplicamos la independencencia de los campos respecto a z llegamos a

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_x, \quad (66)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial x} = -i\omega\mu_0 H_y, \quad (67)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_z, \quad (68)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = -i\omega\varepsilon E_x, \quad (69)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial x} = i\omega\varepsilon E_y, \quad (70)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -i\omega\varepsilon E_z. \quad (71)$$

El conjunto de Ecs. (66), (67) y (71) diferenciales parciales relaciona las componentes H_x , H_y y E_z mientras que el conjunto de Ecs. (68), (69) y (70) relaciona las componentes E_x , E_y y H_z . Como consecuencia, podemos esperar un comportamiento diferente de cada conjunto de componentes de la solución de onda plana. Cuando una onda plana ejerce un cambio de medio, parte de la luz se refleja y parte se transmite. Los vectores de propagación de la onda incidente, reflejada y transmitida se encuentran en un plano que se denomina plano de incidencia (ver Fig. 4).

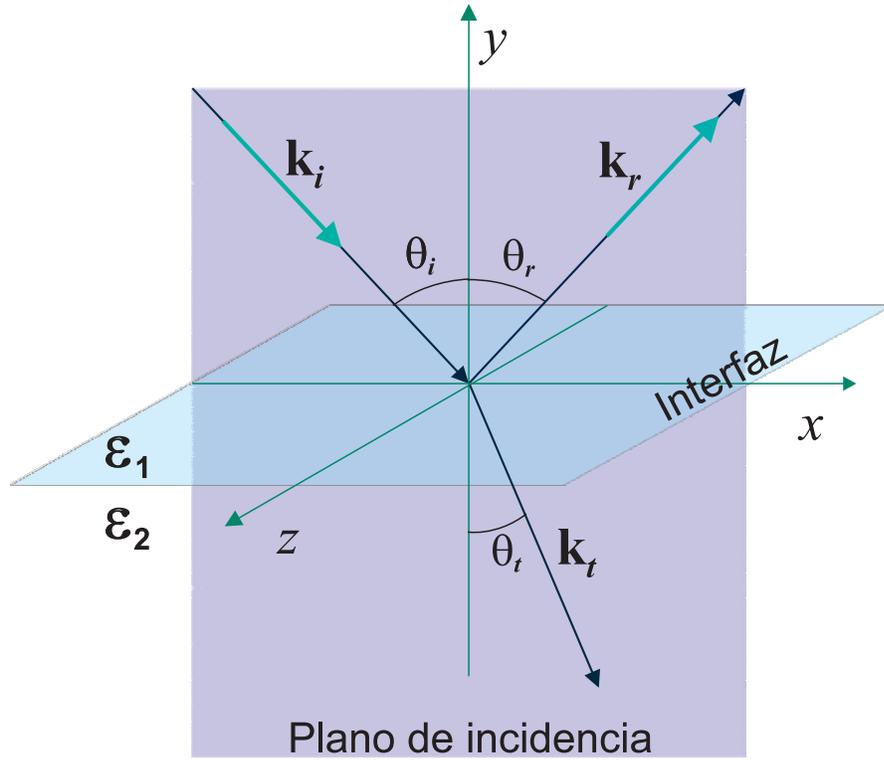


Figura 4. Configuración geométrica de la superficie y de la onda EM incidente.

II.4.1. Polarización transversal eléctrica TE o s

En el caso de que el campo eléctrico sea perpendicular al plano de incidencia, nos referiremos a polarización eléctrica transversal o equivalentemente s, como se muestra en la Fig. 5. En esa situación

$$\mathbf{E} = \hat{\mathbf{e}}_z E_z(x, y), \quad (72)$$

$$\mathbf{H} = \hat{\mathbf{e}}_x H_x(x, y) + \hat{\mathbf{e}}_y H_y(x, y). \quad (73)$$

De la derivada normal de \mathbf{E}

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial n} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla E_z = n_x \frac{\partial E_z}{\partial x} + n_y \frac{\partial E_z}{\partial y}, \quad (74)$$

y de las Ecs. (66) y (67) tenemos que

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial n} = i\omega\mu_0 [-n_x H_y + n_y H_x]. \quad (75)$$

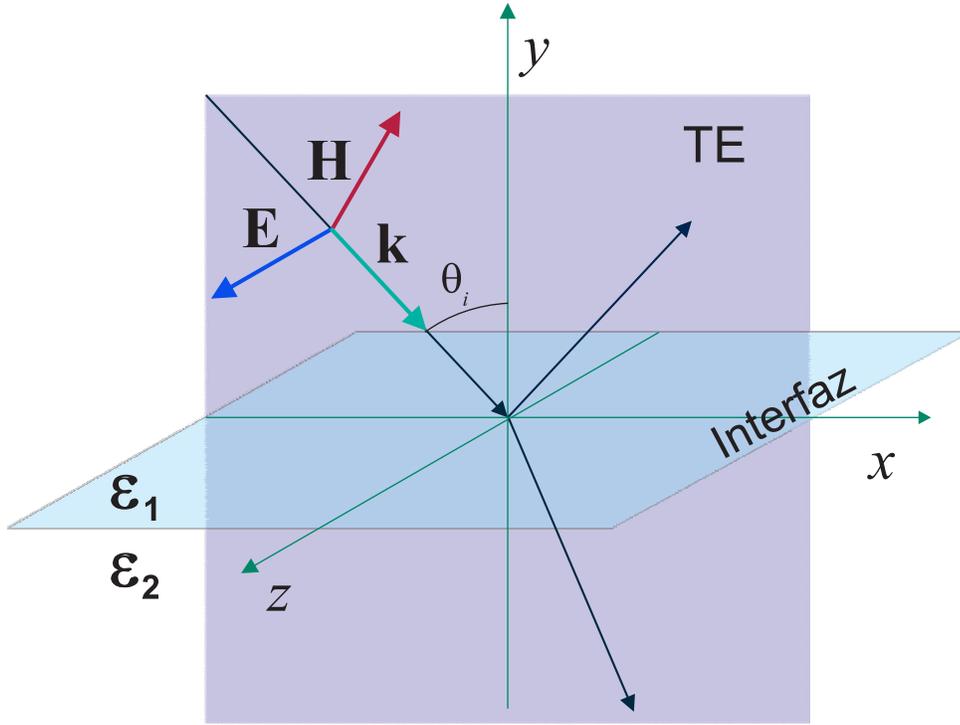


Figura 5. Orientación de los vectores EM con respecto al plano de incidencia para la polarización s.

Ahora, usando la Ec. (55), en la expresión entre paréntesis de la ecuación anterior

$$\mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{t}} = n_y H_x - n_x H_y, \quad (76)$$

y la derivada normal se puede reescribir como

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial n} = i\omega \mu \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{t}}. \quad (77)$$

De la condición de continuidad en la componente tangencial de \mathbf{H} para ambos medios,

$$i\omega \mu_1 \mathbf{H}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}} = i\omega \mu_2 \mathbf{H}_2 \cdot \hat{\mathbf{t}}, \quad (78)$$

se llega a que

$$\frac{1}{\mu_1} \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial n} = \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial \mathbf{E}_2}{\partial n}. \quad (79)$$

Recordando que a frecuencias ópticas en medios dieléctricos y metálicos, la permeabilidad magnética se mantiene constante e igual a la del vacío $\mu_0 = \mu_1 = \mu_2$, por lo que la derivada normal del campo eléctrico es continua a través del límite.

II.4.2. Polarización transversal magnética TM o p

En el caso de que el campo magnético sea perpendicular al plano de incidencia, nos referiremos a polarización transversal magnética o p, como se ilustra en la Fig. 6. En esta circunstancia el conjunto que involucra a las componentes son:

$$\mathbf{H} = \hat{\mathbf{e}}_z H_z(x, y), \quad (80)$$

$$\mathbf{E} = \hat{\mathbf{e}}_x E_x(x, y) + \hat{\mathbf{e}}_y E_y(x, y). \quad (81)$$

Considerando ahora las Ecs. (69) y (70) en la derivada normal de \mathbf{H} ,

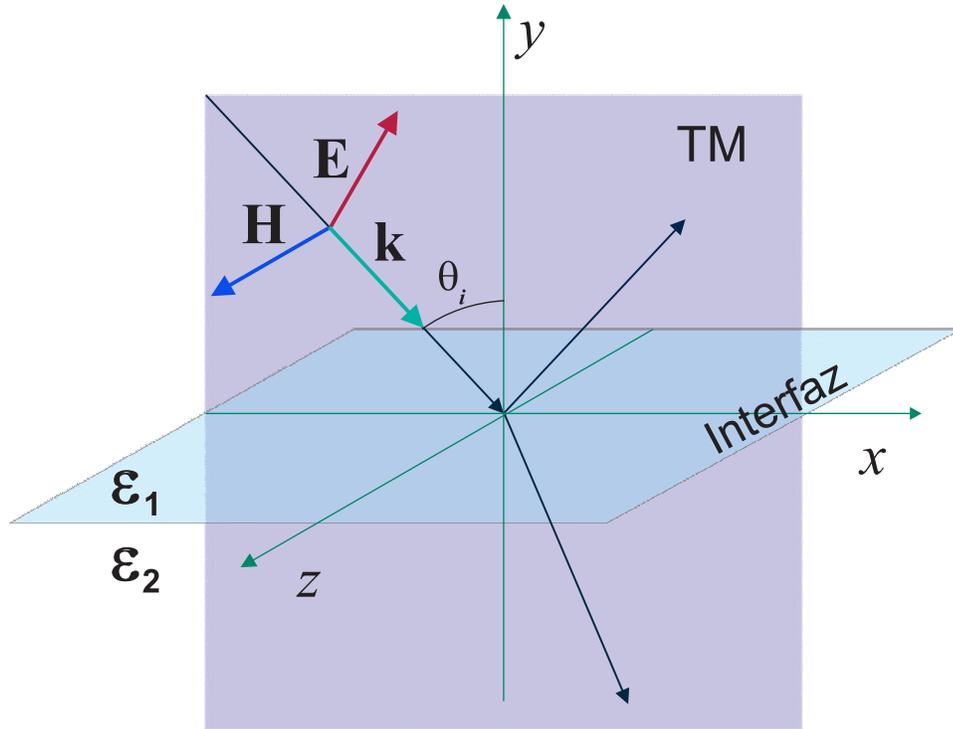


Figura 6. Orientación de los vectores EM con respecto al plano de incidencia para la polarización p.

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial n} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla H_z = n_x \frac{\partial H_z}{\partial x} + n_z \frac{\partial H_z}{\partial y}, \quad (82)$$

y siguiendo los pasos similares del caso de la polarización s, se puede llegar a

$$\frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\partial \mathbf{H}_1}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon_2} \frac{\partial \mathbf{H}_2}{\partial n}. \quad (83)$$

En consecuencia, la derivada normal del vector magnético es discontinua a través del límite.

II.5. Coeficientes de Fresnel

El comportamiento de las ondas planas EM cuando interactúan con una interfaz plana entre dos medios diferentes está dado por los coeficientes de Fresnel, que se pueden derivar aplicando las condiciones de frontera a los campos tangenciales a través de la superficie.

Como encontramos en la sección anterior, cualquier onda plana EM que incida sobre una superficie plana o localmente lisa, se puede descomponer en dos conjuntos de componentes que presentan un comportamiento distinto según el caso de polarización s o p. Si asumimos que nuestros medios se extienden infinitamente en el plano xy donde ambos medios están en contacto, entonces las funciones dieléctricas son independientes de x y y .

Si las partes espaciales de los campos eléctricos incidente, reflejado y transmitido son

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_{0i} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}, \quad (84)$$

$$\mathbf{E}_r = \mathbf{E}_{0r} e^{i\mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r}}, \quad (85)$$

$$\mathbf{E}_t = \mathbf{E}_{0t} e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}}, \quad (86)$$

los coeficientes de transmisión y reflexión de Fresnel, que son cocientes de las componentes tangenciales de los campos, $\rho = \mathbf{E}_r \cdot \hat{\mathbf{t}} / \mathbf{E}_i \cdot \hat{\mathbf{t}}$ y $\tau = \mathbf{E}_t \cdot \hat{\mathbf{t}} / \mathbf{E}_i \cdot \hat{\mathbf{t}}$, respectivamente, constituyen relaciones simples en términos de los índices de refracción de cada medio que en general pueden ser funciones complejas. La relación entre dos medios con índices de refracción n_q y n_j , cuando el campo eléctrico es perpendicular al plano de incidencia

(polarización s), los coeficientes de reflexión y transmisión son:

$$\rho_{qj} = \frac{k^q - k^j}{k^q + k^j}, \quad (87)$$

$$\tau_{qj} = 1 + r_{qj}. \quad (88)$$

Por otro lado, cuando el campo eléctrico es paralelo al plano de incidencia (polarización p) son:

$$\rho_{qj} = \frac{n_q^2 k^j - n_j^2 k^q}{n_q^2 k^j + n_j^2 k^q}, \quad (89)$$

$$\tau_{qj} = \frac{n_q}{n_j} (1 + r_{qj}). \quad (90)$$

En las expresiones anteriores definimos los coeficientes k^l de la siguiente manera:

$$k^l = k_0 \sqrt{n_l^2 - \sin^2(\theta_i)}, \quad (91)$$

con $k_0 = 2\pi/\lambda$, n_l el índice de refracción del l -ésimo medio y θ_i el ángulo incidente en la primera interfaz y λ la longitud de onda incidente.

Las relaciones de reflectancia y transmitancia a través de un límite para materiales dieléctricos o metálicos como medios de transmisión se dan en términos de los coeficientes de Fresnel:

$$R = |\rho|^2, \quad (92)$$

$$T = \frac{\text{Re}(n_j)}{n_q} |\tau|^2. \quad (93)$$

Como ejemplo, la reflectancia y transmitancia que dependen del ángulo de incidencia para los casos de incidencia externa e interna se muestran en la Fig. 7.

II.5.1. Ángulo de Brewster

Cuando se cumple la condición $\theta_i + \theta_t = \pi/2$, se dice que tenemos la condición de Brewster y el ángulo de incidencia donde ocurre se llama ángulo de Brewster. Esta condición se satisface sólo bajo la polarización p y en este caso $\theta_i = \theta_B$.

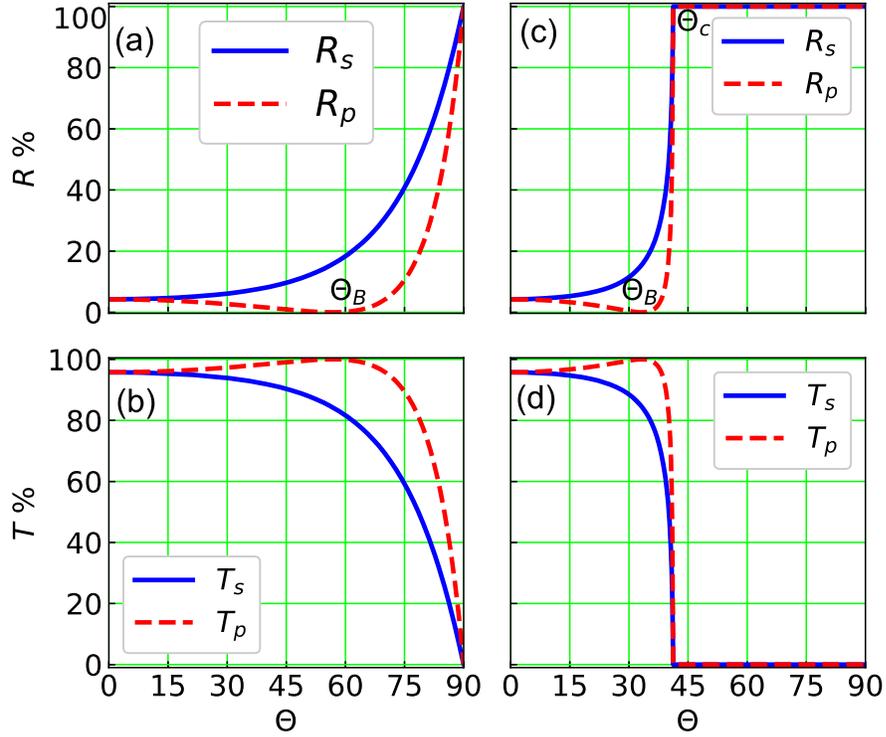


Figura 7. Reflectancia y transmitancia de una interfaz típica entre aire y vidrio con índices de refracción $n_{air} = 1.0$, $n_{vid} = 1.52$ respectivamente. a) y b) R y T cuando $n_1 < n_2$ (incidencia externa: desde el aire). c) y d) R y T cuando $n_1 > n_2$ (incidencia interna: desde el vidrio).

De la ley de Snell: $n_1 \sin(\theta_i) = n_2 \sin(\theta_t)$, bajo la condición de Brewster tenemos:

$$n_1 \sin(\theta_B) = n_2 \sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta_B\right), \quad (94)$$

$$n_1 \sin(\theta_B) = n_2 \cos(\theta_B), \quad (95)$$

$$\tan(\theta_B) = \frac{n_2}{n_1}, \quad (96)$$

$$\theta_B = \arctan\left(\frac{n_2}{n_1}\right). \quad (97)$$

El ángulo de Brewster para la interfaz aire-vidrio se muestra en la Fig. 7(a) y en este caso $\theta_B = 56.7$. El ángulo de Brewster bajo reflexión interna para una interfaz de aire de vidrio se muestra en la Fig. 7(c). En este caso $\theta_B = 33.3$.

II.5.2. Condición del ángulo crítico

Cuando el medio incidente tiene un índice de refracción mayor que el del medio de transmisión, la luz puede reflejarse completamente cuando el ángulo de incidencia excede cierto ángulo llamado ángulo crítico θ_c . De la ley de Snell

$$n_1 \sin(\theta_i) = n_2 \sin(\theta_t), \quad (98)$$

$$n_1^2 \sin^2(\theta_i) = n_2^2 (1 - \cos^2(\theta_t)), \quad (99)$$

lo cual implica que

$$n_1 \cos(\theta_t) = \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_i)}. \quad (100)$$

La condición del ángulo crítico ocurre cuando el radicando $n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_{inc}) = 0$. Esta expresión se puede simplificar a $n_2 = n_1 \sin(\theta_{inc})$. Esto implica que $\theta_t = \frac{\pi}{2}$, y

$$\theta_i \equiv \theta_c = \arcsin\left(\frac{n_2}{n_1}\right), \quad (101)$$

donde el ángulo crítico existe siempre que $n_1 > n_2$. Si $\theta_i > \theta_c$ se provoca reflexión interna total, y para $\theta_i = \theta_c$ entonces $\theta_t = \frac{\pi}{2}$; es decir, el haz transmitido es paralelo a la interfaz. El ángulo crítico para la interfaz vidrio-aire se muestra en la Fig. 7(c) y corresponde a $\theta_c = 41.1^\circ$.

II.6. Método de la Matriz de Transferencia

El Método TMM es utilizado para calcular la respuesta óptica de un sistema compuesto de un número arbitrario de películas delgadas. Para calcular la respuesta óptica, este método se expresa en forma de matrices de 2×2 cuyos elementos se expresan en términos de los coeficientes de Fresnel. En el cual se analizan las condiciones de frontera y propagación de los campos EM a través del sistema de multicapas.

El TMM se compone del producto matricial de dos tipos de matrices \mathbb{T} y \mathbb{P} llamadas matriz de transmisión y matriz de propagación, respectivamente. La matriz de transmisión \mathbb{T} se utiliza en cada una de las interfaces que componen al sistema. Esta matriz es representada como (Yeh, 2005)

$$\mathbb{T}_{qj} = \begin{pmatrix} 1/\tau_{qj} & \rho_{qj}/\tau_{qj} \\ \rho_{qj}/\tau_{qj} & 1/\tau_{qj} \end{pmatrix}, \quad (102)$$

donde ρ_{qj} y τ_{qj} son los coeficientes de Fresnel en reflexión y transmisión entre los medios q y j , los cuales son diferentes para cada polarización (Ecs. (87-90)).

La matriz de propagación \mathbb{P} describe como se propaga la onda electromagnética dentro de cada medio o película delgada, la cual es representada como

$$\mathbb{P}_j = \begin{pmatrix} e^{-i\phi_j} & 0 \\ 0 & e^{i\phi_j} \end{pmatrix}, \quad (103)$$

siendo ϕ_j el retraso en fase definido como

$$\phi_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j d_j \cos(\theta_j) \quad (104)$$

con n_j el índice de refracción de la j -ésima película, d_j el espesor de dicha película y θ_j el ángulo con el cual incide en el medio.

Para relacionar los campos eléctricos en la primer y última interfaz del sistema (ver Fig. 8) tenemos que desarrollar el producto de estas matrices \mathbb{T} y \mathbb{P} obteniendo la matriz resultante \mathbb{M}_T formando el siguiente sistema de ecuaciones con $l = u + 1$ medios:

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{-1} = E_i \\ \tilde{E}_{+1} = E_r \end{pmatrix} = \mathbb{M}_T \begin{pmatrix} \bar{E}_{-l} = E_t \\ \bar{E}_{+l} = 0 \end{pmatrix}, \quad (105)$$

o bien

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{-1} = E_i \\ \tilde{E}_{+1} = E_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{E}_{-l} = E_t \\ \bar{E}_{+l} = 0 \end{pmatrix}. \quad (106)$$

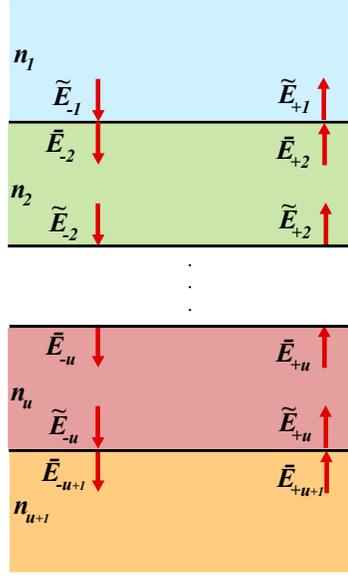


Figura 8. Campos eléctricos en una interfaz entre los medios n_i ($i = 1, 2, \dots, u, u + 1$).

Los campos \tilde{E} representan los campos eléctricos en la parte superior de una interfaz (primera interfaz en el medio 1) y \bar{E} representa los campos eléctricos en la parte inferior de una interfaz (u interfaz en el medio $l = u + 1$), teniendo como ecuaciones resultantes:

$$E_i = m_{11} E_t, \quad (107)$$

$$E_r = m_{21} E_t, \quad (108)$$

de donde obtenemos que

$$t = \frac{E_t}{E_i} = \frac{1}{m_{11}}, \quad (109)$$

$$r = \frac{E_r}{E_i} = \frac{m_{21}}{m_{11}}, \quad (110)$$

de las cuales podemos obtener la reflectancia

$$R = |r|^2 = \left| \frac{m_{21}}{m_{11}} \right|^2,$$

y la transmitancia

$$T = \frac{n_{u+1}}{n_1} |t|^2 = \left| \frac{1}{m_{11}} \right|^2.$$

Para describir como se determina esta matriz \mathbb{M}_T consideremos un sistema de una interfaz con índices de refracción n_1 y n_2 como se muestra en la Fig. 9. Además

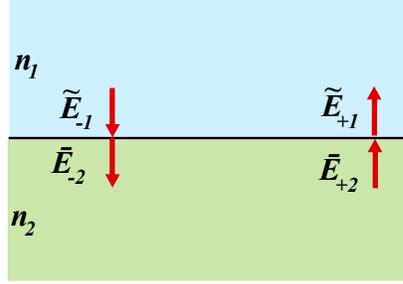


Figura 9. Campos eléctricos en una interfaz entre los medios n_1 y n_2 .

tenemos los campos $\tilde{E}_{\pm 1}$, correspondientes a los campos eléctricos en la parte superior de la interfaz en el medio n_1 y los campos $\bar{E}_{\pm 2}$, correspondientes a los campos eléctricos en la parte inferior de la interfaz en el medio n_2 . Los subíndices con $+$ corresponden a ondas que van en la dirección positiva del eje z y con $-$ a los que van en la dirección negativa. Entonces los campos asociados a estas ondas están relacionados por una matriz de transmisión \mathbb{T} de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{-1} \\ \tilde{E}_{+1} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_{12} \begin{pmatrix} \bar{E}_{-2} \\ \bar{E}_{+2} \end{pmatrix}, \quad (111)$$

siendo la matriz resultante \mathbb{M}_T tomada como

$$\mathbb{M}_T = \mathbb{T}_{12}.$$

Para el caso del sistema con una capa formada por dos interfaces que separan los medios con índices de refracción n_1 , n_2 y n_3 , como se muestra en la Fig. 10, se tiene que los campos $\tilde{E}_{\pm 1}$, correspondientes a los campos eléctricos en la parte superior de la primera interfaz en el medio n_1 y los campos $\bar{E}_{\pm 2}$ correspondientes a los campos eléctricos en la parte inferior de la primera interfaz. Los campos $\tilde{E}_{\pm 2}$, corresponden a los campos superiores de la segunda interfaz dentro del medio n_2 , y por último tenemos los campos

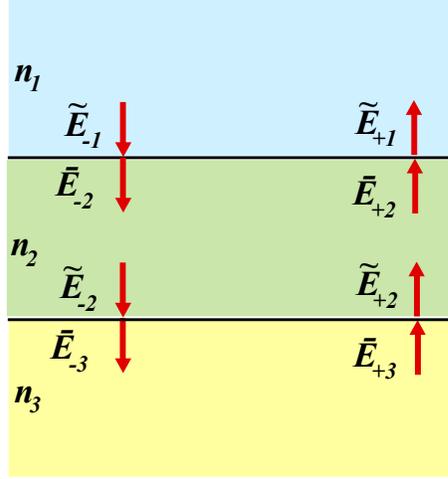


Figura 10. Campos eléctricos en dos interfaces entre los medios n_1 , n_2 y n_3 .

$\bar{E}_{\pm 3}$, correspondientes a los campos inferiores del medio n_3 . Sabemos que los campos $\tilde{E}_{\pm 1}$ y los campos $\bar{E}_{\pm 2}$ se relacionan por la matriz de transmisión al igual que los campos $\tilde{E}_{\pm 2}$ y los campos $\bar{E}_{\pm 3}$, de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{-1} \\ \tilde{E}_{+1} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_{12} \begin{pmatrix} \bar{E}_{-2} \\ \bar{E}_{+2} \end{pmatrix} \quad (112)$$

y

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{-2} \\ \tilde{E}_{+2} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_{23} \begin{pmatrix} \bar{E}_{-3} \\ \bar{E}_{+3} \end{pmatrix}. \quad (113)$$

Para los campos $\bar{E}_{\pm 2}$, $\tilde{E}_{\pm 2}$ debemos considerar una nueva matriz que considere el espesor de la capa sobre la cual se propaga el campo, así llegamos a la matriz \mathbb{P} que es la matriz de propagación que relaciona los campos inferiores y superiores en el mismo medio de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \bar{E}_{-2} \\ \bar{E}_{+2} \end{pmatrix} = \mathbb{P}_2 \begin{pmatrix} \tilde{E}_{-2} \\ \tilde{E}_{+2} \end{pmatrix}. \quad (114)$$

Así relacionamos las Ecs. (112) y (114) llegando a

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{-1} \\ \tilde{E}_{+1} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_{12} \mathbb{P}_2 \begin{pmatrix} \tilde{E}_{-2} \\ \tilde{E}_{+2} \end{pmatrix}. \quad (115)$$

Ahora relacionamos las Ecs. (115) y (113), obteniendo

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_{-1} \\ \tilde{E}_{+1} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_{12}\mathbb{P}_2\mathbb{T}_{23} \begin{pmatrix} \bar{E}_{-3} \\ \bar{E}_{+3} \end{pmatrix},$$

siendo la matriz resultante \mathbb{M}_T dada por

$$\mathbb{M}_T = \mathbb{T}_{12}\mathbb{P}_2\mathbb{T}_{23}.$$

De manera general para j capas con $u = j + 1$ interfaces (ver Fig. 8) la matriz resultante o la matriz de transferencia es:

$$\mathbb{M}_T = \left(\prod_{g=1}^{u-1} \mathbb{T}_{gg+1}\mathbb{P}_{g+1} \right) \mathbb{T}_{uu+1}.$$

II.7. Plasmones superficiales

Muchas de las propiedades fundamentales del estado sólido pueden ser descritas con una analogía de un sólo electrón moviéndose en un arreglo periódico de átomos a los que se les asocia una carga positiva. En otras palabras utilizando el concepto de Plasma que, desde el punto de vista teórico los plasmones superficiales (SPs) se tratarán como la representación de ondas electromagnéticas de superficie, cuyo máximo de intensidad se da en la superficie y con un decaimiento exponencial perpendicular en la dirección a la superficie. Los SPs pueden ser excitados por luz. De esta manera el plasmón, se define como un cuanto de energía asociado con ondas propagándose en la interfaz metal-dieléctrico a través del movimiento colectivo de un gran número de electrones. La energía de un plasmón es característica tanto del tipo de material como de la geometría del sistema. Si un campo eléctrico (invariante en el tiempo) actúa sobre una partícula u otra muestra delimitada, el campo polariza la muestra con una densidad de carga eléctrica (variante en el tiempo). Las cargas inducidas en la superficie actúan una sobre

otra eléctricamente de una manera colectiva para regresar al equilibrio. Si dicho campo es suspendido, un regreso muy rápido hacia el equilibrio le da a las cargas más energía cinética, la cual les produce un equilibrio sobre saturado. El proceso es reversible y entonces, oscilaciones colectivas de carga superficial son establecidas y se les denomina Plasmones de Superficie. Desde una perspectiva cuántica, a los SPs se les asocia además de energía, ondas electromagnéticas. Estas ondas, viajando a lo largo de la interfaz de dos medios diferentes se les conoce como Ondas de Plasma Superficiales (SPWs¹).

La frecuencia natural de oscilación de los plasmones en un medio puede ser obtenida en función del número de electrones libres y su masa. A ésta se le llama frecuencia de plasma que está dada por la Ec. (35).

Los SPs son modos electromagnéticos que aparecen en una interfaz entre un dieléctrico y un metal, como consecuencia de la interacción entre la luz y los electrones de conducción de una superficie metálica. Para determinar las propiedades de los plasmones se aplican las ecuaciones de Maxwell a una interfaz plana metal-dieléctrico (ver Fig. 11).



Figura 11. Interfaz plana metal - dieléctrico.

Partiendo de las Ecs. (66-71) para analizar la propagación del campo en una dimensión, se tiene que la permitividad eléctrica ε depende sólo de una coordenada espacial. Para ello, consideremos que la onda viaja en la dirección x sin variación perpendicular en el plano $z = 0$, tal que para el plano $y = 0$ el campo eléctrico se puede

¹Por sus siglas en inglés, Surface Plane Waves

describir de la forma $E(x, y) = E(y)e^{i\beta x} = 0$, como se muestra en la Fig. 11. Definiendo a $\beta = k_x$ la constante de propagación de la onda viajera, que corresponde a la componente del vector de onda en la dirección de propagación. Para ondas planas se cumple que la $\frac{\partial}{\partial t} = -i\omega$ y además por la propagación sólo en la dirección x , $\frac{\partial}{\partial x} = i\beta$, se pueden reescribir las Ecs. (66)-(71) como:

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_x, \quad (116)$$

$$i\beta E_z = -i\omega\mu_0 H_y, \quad (117)$$

$$i\beta E_y - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_z, \quad (118)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = -i\omega\varepsilon E_x, \quad (119)$$

$$i\beta H_z = i\omega\varepsilon E_y, \quad (120)$$

$$i\beta H_y - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -i\omega\varepsilon E_z. \quad (121)$$

Consideremos las Ecs. (118), (119) y (120) para las componentes E_x , E_y y H_z diferentes de cero; es decir, para modos transversales magnéticos (polarización p), se reducen a

$$E_x = -\frac{1}{i\omega\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial y}, \quad (122)$$

$$E_y = \frac{\beta}{\omega\varepsilon} H_z. \quad (123)$$

Para los modos transversales eléctricos (polarización s), tomamos las Ecs. (116), (117) y (121) con las componentes H_x , H_y y E_z diferentes de cero, se obtiene

$$H_x = \frac{1}{i\omega\mu_0} \frac{\partial E_z}{\partial y}, \quad (124)$$

$$H_y = -\frac{\beta}{\omega\mu_0} E_z. \quad (125)$$

Suponiendo que para la interfaz plana metal-dieléctrico en $y > 0$ está presente el dieléctrico de permitividad eléctrica real ε_2 , y para $y < 0$ se tiene un material metálico

con permitividad eléctrica ε_1 (Fig. 11), se puede definir a $H_{z2}(y) = A_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 y}$. Así para $y > 0$, las Ecs. (122) y (123) se reescriben como

$$E_{x2} = -iA_2 \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 y}, \quad (126)$$

$$E_{y2} = A_2 \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} e^{i\beta x} e^{-k_2 y}. \quad (127)$$

Para $y < 0$, $H_{z1}(y) = A_1 e^{i\beta x} e^{k_1 y}$, sobre estas mismas ecuaciones, se obtiene

$$E_{x1} = iA_1 \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 e^{i\beta x} e^{k_1 y}, \quad (128)$$

$$E_{y1} = A_1 \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} e^{i\beta x} e^{k_1 y}, \quad (129)$$

donde $k_1 = k_{y1}$ y $k_2 = k_{y2}$ son las componentes del vector de onda perpendicular a la interfaz.

Utilizando la Ec. (51) en las Ecs. (127) y (129) tenemos que

$$\begin{aligned} \varepsilon_2 E_{y2} - \varepsilon_1 E_{y1} &= 0, \\ A_2 \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0} e^{i\beta x} e^{-k_2 y} \Big|_{y=0} - A_1 \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0} e^{i\beta x} e^{k_1 y} \Big|_{y=0} &= 0, \\ A_2 &= A_1, \end{aligned} \quad (130)$$

y usando la Ec. (53) en las Ecs. (126) y (128),

$$\begin{aligned} E_{x2} - E_{x1} &= 0, \\ -iA_2 \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 y} \Big|_{xz} - iA_1 \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 e^{i\beta x} e^{-k_1 y} \Big|_{xz} &= 0, \\ \frac{A_2 k_2}{\varepsilon_2} &= -\frac{A_1 k_1}{\varepsilon_1}. \end{aligned} \quad (131)$$

Finalmente sustituyendo la Ec. (130) en la Ec. (131), obtenemos la relación

$$\frac{k_{y1}}{\varepsilon_1} + \frac{k_{y2}}{\varepsilon_2} = 0. \quad (132)$$

La expresión de H_z tiene que satisfacer la ecuación de onda para la polarización p, llegando a lo siguiente:

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial y^2} + (k_0^2 \varepsilon + \beta^2) H_z = 0, \quad (133)$$

por lo que se obtienen las siguientes condiciones:

$$k_{y1} = \beta^2 + k_0^2 \varepsilon_1, \quad (134)$$

$$k_{y2} = \beta^2 + k_0^2 \varepsilon_2. \quad (135)$$

Combinando las Ecs. (132), (134) y (135) se llega a la relación de dispersión de los plasmones que se propagan en una interfaz entre los dos medios. La relación de dispersión conecta la longitud de onda con el vector de onda con su frecuencia y se expresa de la siguiente manera:

$$\beta = k_0 \left(\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right)^{1/2}, \quad (136)$$

o bien,

$$k_y^2 = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}. \quad (137)$$

Utilizando la ecuación anterior, se pueden obtener las curvas de dispersión. En la Fig. 12 se observa que para valores bajos de k_y , la relación de dispersión es lineal. Vemos

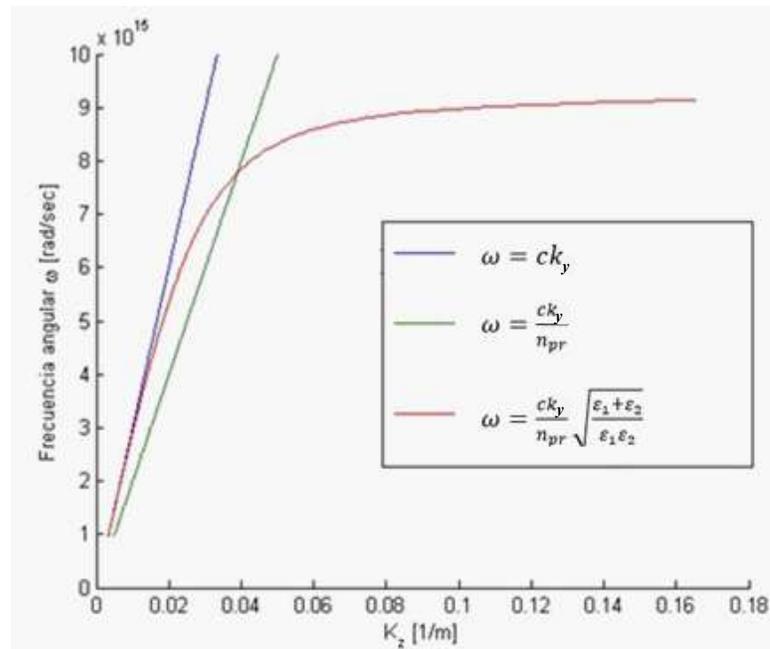


Figura 12. Curvas de la relación de dispersión para un SP en un medio dieléctrico tomada de la Ref. Almog *et al.* (2011).

a medida que k_y aumenta, la relación de dispersión se va curvando hasta alcanzar un

valor límite llamado “frecuencia de plasma superficial”. Además, se observa que la curva de dispersión del plasmón superficial cruza con la línea recta (verde) que pasa por un medio dieléctrico con un índice de refracción n_{pr} (prisma). Sin embargo, la curva de dispersión del plasmón superficial no cruza con la línea recta (azul) del aire. Por lo tanto, los SPPs no pueden ser excitados directamente por la luz que se propaga del aire a un medio metálico. Como acabamos de demostrar si se tienen modos transversales magnéticos se logra la excitación de los SPPs como se muestra en la Fig. 13; en cambio, para modos transversales eléctricos no es posible como a continuación lo veremos.

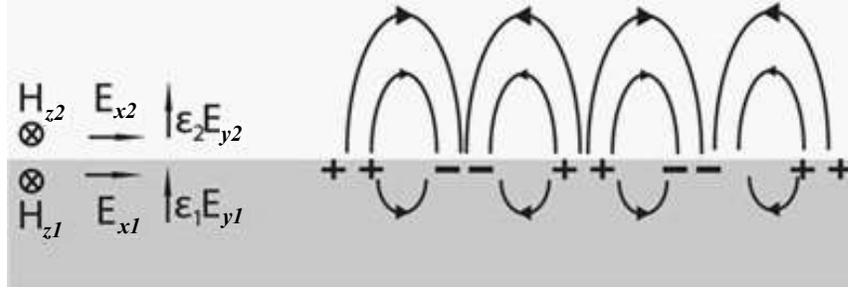


Figura 13. Plasmón superficial formado en una interfaz metal-dieléctrico.

Para los modos transversales eléctricos s, volvemos a suponer la interfaz plana metal-dieléctrico donde en $y > 0$ está presente el dieléctrico de permitividad eléctrica real ε_2 , y para $y < 0$ se tiene un material metálico con permitividad eléctrica ε_1 (Fig. 11). De igual forma se puede definir a $E_{z2}(y) = C_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 y}$. Así para $y > 0$, las Ecs. (124) y (125) se reescriben como

$$\begin{aligned} H_{x2} &= C_2 \frac{i}{\omega \mu_0} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 y}, \\ H_{y2} &= C_2 \frac{-\beta}{\omega \mu_0} e^{i\beta x} e^{-k_2 y}. \end{aligned} \quad (138)$$

Para $y < 0$, $E_{z1}(y) = C_1 e^{i\beta x} e^{k_1 y}$, sobre las mismas ecuaciones, se obtiene

$$H_{x1} = -C_1 \frac{i}{\omega \varepsilon_0} k_1 e^{i\beta x} e^{k_1 y}, \quad (139)$$

$$H_{y1} = -C_1 \frac{\beta}{\omega \mu_0} e^{i\beta x} e^{k_1 y}. \quad (140)$$

Ahora utilizando la Ec. (52) en las Ecs. (138) y (140), tenemos que

$$\begin{aligned}
 \mu_0 H_{y2} - \mu_0 H_{y1} &= 0, \\
 -C_2 \frac{\beta}{\omega} e^{i\beta x} e^{-k_2 y} \Big|_{y=0} + C_1 \frac{\beta}{\omega} e^{i\beta x} e^{k_1 y} \Big|_{y=0} &= 0, \\
 C_2 &= C_1,
 \end{aligned} \tag{141}$$

y usando la Ec. (54) en las Ecs. (138) y (139), obtenemos

$$\begin{aligned}
 H_{x2} - H_{x1} &= 0, \\
 C_2 \frac{i}{\omega \mu_0} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 y} \Big|_{xz} + C_1 \frac{i}{\omega \varepsilon_0} k_1 e^{i\beta x} e^{k_1 y} \Big|_{xz} &= 0, \\
 C_2 k_2 &= -C_1 k_1.
 \end{aligned} \tag{142}$$

Finalmente sustituyendo la Ec. (141) en la Ec. (142), se llega a la relación

$$C_1(k_{y2} + k_{y1}) = 0, \tag{143}$$

lo cual nos dice que $C_1 = C_2 = 0$, es decir no existe SPPs para una polarización transversal eléctrica en una interfaz metal-dieléctrico. Por lo tanto, sólo pueden existir para los modos transversales magnéticos p (E_x , E_y y $H_z \neq 0$, ver Fig. 13).

Capítulo III

EL MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL

En este capítulo se describe una técnica rigurosa para modelar la interacción de la luz con una configuración de diferentes películas delgadas. La técnica se conoce como el Método de la Ecuación Integral (IEM). El método se aplica, en particular, para estudiar la propagación de luz a través de sistemas con geometrías dadas. Además, se presenta un planteamiento teórico que permite evaluar los coeficientes de reflexión y transmisión. Asimismo, se hace una comparación de los resultados del método numérico con los resultados analíticos para casos particulares de sistemas de multicapas.

III.1. Descripción del Método de la Ecuación Integral

Una de las aplicaciones del método numérico de la ecuación integral permite encontrar el comportamiento de la luz a diferentes ángulos de incidencia mediante el cálculo de la reflectancia y la transmitancia. Para ello, se considera un sistema de j películas en un arreglo periódico embebidas entre un medio de incidencia y un medio de transmisión,

caracterizadas por n_l ($l = 1, 2, \dots, j + 2$) para cada medio del sistema y espesores d_q ($q = 1, 2, \dots, j$) como se muestra en la Fig. 14.

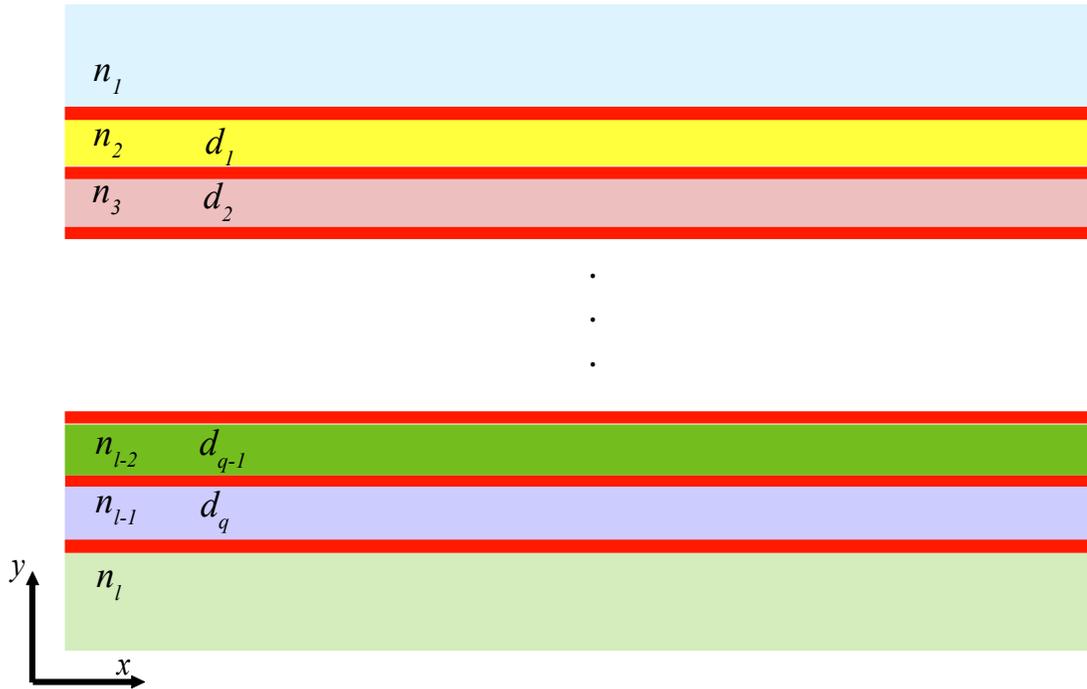


Figura 14. Sistema de j películas de espesor d_q siendo $q = 1, 2, \dots, j$, rodeadas por un medio incidente y un medio de transmisión, con n_l siendo $l = 1, 2, \dots, j + 2$, el índice de refracción de cada medio.

El método se plantea en base al segundo teorema integral de Green aplicado a la ecuación de Helmholtz que tiene como incógnitas el campo y su derivada normal evaluadas sobre las fronteras de las superficies involucradas. Posteriormente se discretiza el sistema de ecuaciones integrales, obteniéndose una ecuación matricial inhomogénea cuya solución tiene como resultado las funciones fuente, con las cuales se pueden encontrar la reflectancia y la transmitancia.

Este método implica ecuaciones independientes del tiempo, dado que se plantea en el

espacio de las longitudes de onda y se aplica a sistemas en 2D funciona a lo largo de los contornos de las fronteras involucradas en las geometrías que se consideran. A diferencia del TMM en el cual se asumen superficies perfectamente planas y de dimension infinita, en el método integral es posible considerar superficies complejas con rugosidad aleatoria e incluso superficies de estructura fractal.

Partiendo de las Ecs. (12) y (13) para los campos \mathbf{E} y \mathbf{H} , las cuales en forma general se pueden reescribir como la ecuación:

$$\nabla^2 \Psi_l(\mathbf{r}) + k_l^2 \Psi_l(\mathbf{r}) = 0. \quad (144)$$

Así en la Ec. (144), Ψ_l representa el campo magnético o el campo eléctrico en el l -ésimo medio, siendo $l = 1, 2, 3, \dots, j + 2$. De igual forma, la magnitud del vector de onda está dada por:

$$k_l = n_l(\lambda) \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (145)$$

donde el índice de refracción $n_l(\lambda) = \sqrt{\mu_l(\lambda)\varepsilon_l(\lambda)}$, involucra las propiedades de los materiales y está dado en términos de la permeabilidad magnética $\mu_l(\lambda)$ y la permitividad eléctrica $\varepsilon_l(\lambda)$; ambas funciones dependientes de la longitud de onda λ o bien de la frecuencia ω .

Para resolver la Ec. (144) vamos a introducir una función de Green $G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, la cual es una solución de la ecuación:

$$\nabla^2 G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k_l^2 G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (146)$$

donde $G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}(k_l|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ siendo $H_0^{(1)}$ la función de Hankel de primera clase y de orden cero y $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ es la delta de Dirac. Para mayores detalles consultar la Ref. Gibson (2007).

III.1.1. Forma integral y discretización de la ecuación de Helmholtz

Aplicando la segunda identidad de Green a las funciones $\Psi_l(\mathbf{r})$ y $G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, para la región incidente del vacío ($l = 1$) con una onda incidente, se obtiene el campo total

$$\Psi_{inc}(\mathbf{r}) + \Psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_1} \left[\frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_1(\mathbf{r}') - G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] ds', \quad (147)$$

donde Γ_1 representa el contorno cerrado que delimita la superficie S_1 (ver Fig. 15).

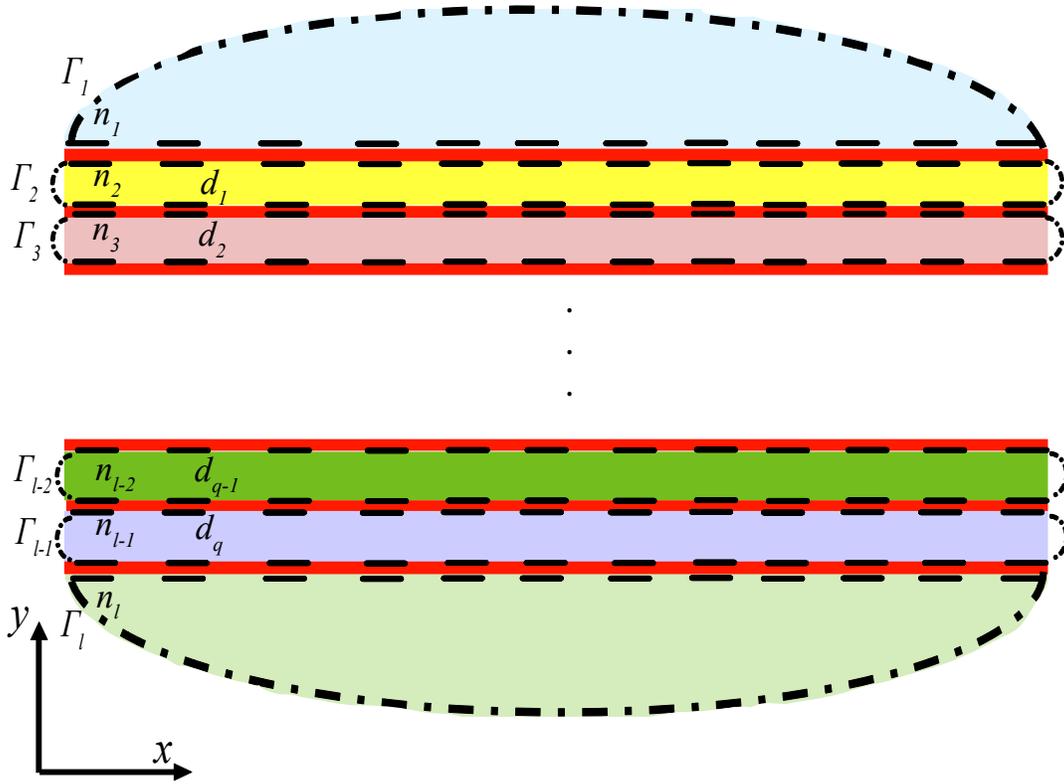


Figura 15. Sistema de j películas de espesor d_q siendo $q = 1, 2, \dots, j$, rodeadas por un medio incidente y un medio de transmisión, con n_l el índice de refracción de cada medio y su respectivo contorno denotado por Γ_l siendo $l = 1, 2, \dots, j + 2$.

Las funciones fuente $\Psi_1(\mathbf{r}')$ y $\frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'_1}$, que representan los valores del campo eléctrico o magnético y su derivada normal evaluadas sobre el contorno Γ_1 . Para los valores de

($l > 1$) tenemos

$$\Theta(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_l} \left[\frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_1(\mathbf{r}') - G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] ds', \quad (148)$$

donde la integral de superficie se ha representado mediante el producto del campo por la función escalón,

$$\Theta(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \in S, \\ 0 & \text{si } \mathbf{r} \notin S, \end{cases} \quad (149)$$

y se toma la consideración que $\mathbf{r} \in S$ si la normal apunta hacia el medio donde ésta se encuentra.

En la Ec. (148) se tienen dos integrales de contorno las cuales, al dividir en N pequeños segmentos de longitud de arco Δs , las integrales pueden ser expresadas como:

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_l} \left[\frac{\partial G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_l(\mathbf{r}') \right] ds' \approx \frac{1}{4\pi} \sum_{n=1}^N \Psi_n^l \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (150)$$

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_l} \left[G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_l(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] ds' \approx \frac{1}{4\pi} \sum_{n=1}^N \Phi_n^l \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds', \quad (151)$$

donde se han definido las funciones

$$\Phi_n^l = \left. \frac{\partial \Psi_l(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}'_n}, \quad (152)$$

$$\Psi_n^l = \Psi_l(\mathbf{r}')_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}'_n}. \quad (153)$$

En las Ecs. (150) y (151) se ha considerado que Δs es lo suficientemente pequeño para que podamos tener un muestreo fino y así poder considerar que el campo $\Psi_l(\mathbf{r})$ y su derivada normal $\frac{\partial \Psi_l(\mathbf{r}')}{\partial n'}$ sean aproximadamente constantes.

Ahora, evaluando las integrales de las Ecs. (150) y (151) en el punto de observación

$\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$, se obtienen los elementos de matriz definidos por

$$L_{mn} = \frac{1}{4\pi} \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds', \quad (154)$$

$$N_{mn} = \frac{1}{4\pi} \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (155)$$

donde el subíndice m indica el punto de observación y el subíndice n el punto de integración. Estos elementos de matriz, ya calculados (Centeno Jiménez, 2014), están dados por las expresiones:

$$L_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4\pi} H_0^{(1)}(k_j R_{mn})(1 - \delta_{mn}) + \left[\frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)} \left(k_j \frac{\Delta s}{2e} \right) \right] \delta_{mn}, \quad (156)$$

$$N_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4\pi} k_j H_1^{(1)}(k_j R_{mn}) \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} (1 - \delta_{mn}) + \left[\frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n \right] \delta_{mn}, \quad (157)$$

siendo

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{R}_{mn} = -y'(s)(x_m - x_n) + x'(s)(y_m - y_n), \quad (158)$$

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n = x'(s)y''(s) - y'(s)x''(s), \quad (159)$$

$$R_{mn} = \sqrt{(x_m - x_n)^2 + (y_m - y_n)^2}. \quad (160)$$

III.2. Sistema de multicapas de películas delgadas

Para ilustrar el IEM vamos a considerar diferentes sistemas de multicapas y su correspondiente sistema de ecuaciones algebraico general correspondiente a j películas delgadas. Cabe mencionar que los sistemas para 1 y 2 interfaces ya se han desarrollado (Puente Díaz, 2017) y por lo mismo en este trabajo se presentará a partir de 3 interfaces.

III.2.1. Sistema de 2 películas delgadas

Al aplicar la Ec. (148) para un sistema de 2 películas delgadas formadas con 3 interfaces sobre los contornos de cada región Γ_l que componen el sistema como se ilustra en la Fig. 16, obtenemos las ecuaciones integrodiferenciales:

$$\Psi_1(\mathbf{r}) + \Psi_{inc}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_1} \left[G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_1(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (161)$$

$$0 = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_2} \left[G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_2(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (162)$$

$$\Psi_3(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_3} \left[G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_3(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_3(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (163)$$

$$0 = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_4} \left[G_4(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_4(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_4(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_4(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (164)$$

que en términos de las sumatorias (Ecs. (154) y (155)), se obtiene el siguiente sistema

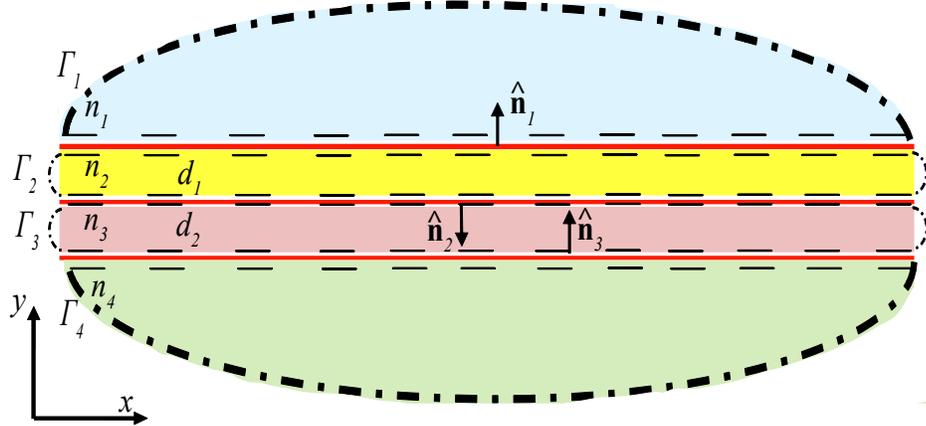


Figura 16. Sistema de 2 películas delgadas formadas con 3 interfaces siendo n_i y Γ_i ($i = 1, 2, 3, 4$), los índices de refracción y los contornos de las superficies, respectivamente.

de ecuaciones:

$$-\sum_{n=1}^N L_{mn,1}^1 \Phi_{n,1}^1 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,1}^1 - \delta_{mn,1}] \Psi_{n,1}^1 = \Psi_{inc}, \quad (165)$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,1}^2 \Phi_{n,1}^2 - \sum_{n=1}^N N_{mn,1}^2 \Psi_{n,1}^2 + \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^2 \Phi_{n,2}^2 - \sum_{n=1}^N N_{mn,2}^2 \Psi_{n,2}^2 = 0, \quad (166)$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^3 \Phi_{n,2}^3 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,2}^3 - \delta_{mn,2}] \Psi_{n,2}^3, \\
& - \sum_{n=1}^N L_{mn,3}^3 \Phi_{n,3}^3 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,3}^3 - \delta_{mn,3}] \Psi_{n,3}^3 = 0,
\end{aligned} \tag{167}$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,3}^4 \Phi_{n,3}^4 - \sum_{n=1}^N N_{mn,3}^4 \Psi_{n,3}^4 = 0. \tag{168}$$

Ahora aplicando las condiciones de frontera de las Ecs. (79) y (83) de los diferentes contornos Γ_l dadas para ambas polarizaciones por

$$\Psi_{n,k}^i = \Psi_{n,k}^{i+1}, \tag{169}$$

$$\Phi_{n,k}^i = f_{ii+1} \Phi_{n,k}^{i+1}, \tag{170}$$

donde f_{ii+1} corresponde a μ_i/μ_{i+1} o $\varepsilon_i/\varepsilon_{i+1}$ dependiendo la polarización, con i número de interfaces, podemos reescribir las Ecs. (165-168) de la siguiente manera:

$$-f_{12} \sum_{n=1}^N L_{mn,1}^1 \Phi_{n,1}^2 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,1}^1 - \delta_{mn,1}] \Psi_{n,1}^2 = \Psi_{inc}, \tag{171}$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,1}^2 \Phi_{n,1}^2 - \sum_{n=1}^N N_{mn,1}^2 \Psi_{n,1}^2 + f_{23} \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^2 \Phi_{n,2}^3 - \sum_{n=1}^N N_{mn,2}^2 \Psi_{n,2}^3 = 0, \tag{172}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^3 \Phi_{n,2}^3 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,2}^3 - \delta_{mn,2}] \Psi_{n,2}^3 \\
& - f_{34} \sum_{n=1}^N L_{mn,3}^3 \Phi_{n,3}^4 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,3}^3 - \delta_{mn,3}] \Psi_{n,3}^4 = 0,
\end{aligned} \tag{173}$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,3}^4 \Phi_{n,3}^4 - \sum_{n=1}^N N_{mn,3}^4 \Psi_{n,3}^4 = 0. \tag{174}$$

Para determinar las fuentes cada ecuación se evalúa en todos los puntos del contorno correspondiente, constituyendo así un sistema lineal e inhomógeno de ecuaciones de rango $6N \times 6N$. El cual se puede reescribir de manera matricial con 36 entradas de $N \times N$. Para simplificar la notación matricial, las submatrices $\mathbb{A}_{uo}^l = \mathbb{A}_{m,u,n,o}^l$ denotan

el elemento A evaluado en el punto m del contorno Γ_u del observador, y el punto n en el contorno Γ_o de integración para el medio l ,

$$\mathbb{M} = \begin{bmatrix} -f_{12}L_{11}^1 & N_{11}^1 - \delta_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{11}^2 & -N_{11}^2 & f_{23}L_{12}^2 & -N_{12}^2 & 0 & 0 \\ L_{21}^2 & -N_{21}^2 & f_{23}L_{22}^2 & -N_{22}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -L_{22}^3 & N_{22}^3 - \delta_{22} & -f_{34}L_{23}^3 & N_{23}^3 - \delta_{23} \\ 0 & 0 & -L_{32}^3 & N_{32}^3 - \delta_{32} & -f_{34}L_{33}^3 & N_{33}^3 - \delta_{33} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & L_{33}^4 & -N_{33}^4 \end{bmatrix}. \quad (175)$$

III.2.2. Sistema de 3 películas delgadas

Ahora al aplicar la Ec. (148) para un sistema de 3 películas delgadas formadas con 4 interfaces sobre los contornos Γ_l de cada región que componen el sistema visto en la Fig. 17, obtenemos las ecuaciones integrodiferenciales:

$$\Psi_1(\mathbf{r}) + \Psi_{inc}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_1} \left[G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_1(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (176)$$

$$0 = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_2} \left[G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_2(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (177)$$

$$\Psi_3(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_3} \left[G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_3(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_3(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (178)$$

$$0 = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_4} \left[G_4(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_4(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_4(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_4(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (179)$$

$$\Psi_5(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_5} \left[G_5(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_5(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_5(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_5(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (180)$$

o bien en términos de las sumatorias, tenemos

$$-\sum_{n=1}^N L_{mn,1}^1 \Phi_{n,1}^1 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,1}^1 - \delta_{mn,1}] \Psi_{n,1}^1 = \Psi_{inc} \quad (181)$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,1}^2 \Phi_{n,1}^2 - \sum_{n=1}^N N_{mn,1}^2 \Psi_{n,1}^2 + \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^2 \Phi_{n,2}^2 - \sum_{n=1}^N N_{mn,2}^2 \Psi_{n,2}^2 = 0, \quad (182)$$

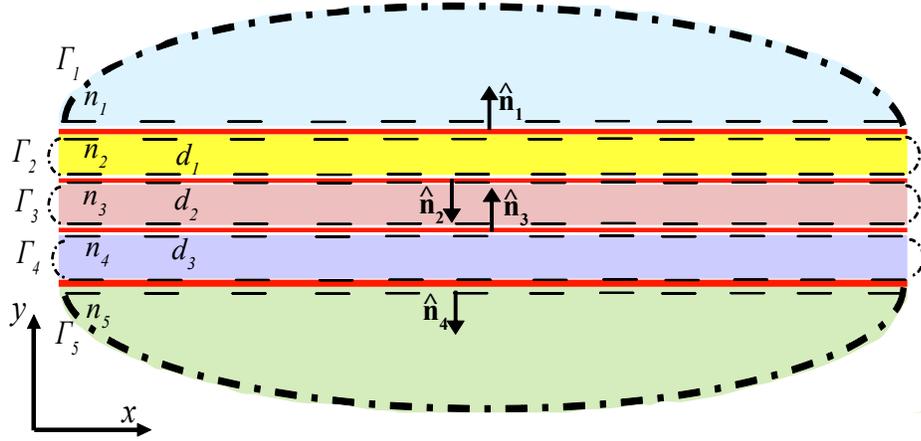


Figura 17. Sistema de 3 películas delgadas formadas con 4 interfaces siendo n_i y Γ_i ($i = 1, 2, 3, 4, 5$), los índices de refracción y los contornos de las superficies, respectivamente.

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^3 \Phi_{n,2}^3 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,2}^3 - \delta_{mn,2}] \Psi_{n,2}^3, \\
 & - \sum_{n=1}^N L_{mn,3}^3 \Phi_{n,3}^3 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,3}^3 - \delta_{mn,3}] \Psi_{n,3}^3 = 0,
 \end{aligned} \tag{183}$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,3}^4 \Phi_{n,3}^4 - \sum_{n=1}^N N_{mn,3}^4 \Psi_{n,3}^4 + \sum_{n=1}^N L_{mn,4}^4 \Phi_{n,4}^4 - \sum_{n=1}^N N \Psi_{n,4}^4 = 0, \tag{184}$$

$$- \sum_{n=1}^N L_{mn,4}^5 \Phi_{n,4}^5 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,4}^5 - \delta_{mn,4}] \Psi_{n,4}^5 = 0.$$

Nuevamente usando las condiciones de frontera (Ecs. (169-170)), el sistema de ecuaciones anterior se reescribe como

$$-f_{12} \sum_{n=1}^N L_{mn,1}^1 \Phi_{n,1}^2 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,1}^1 - \delta_{mn,1}] \Psi_{n,1}^2 = \Psi_{inc}, \tag{185}$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,1}^2 \Phi_{n,1}^2 - \sum_{n=1}^N N_{mn,1}^2 \Psi_{n,1}^2 + f_{23} \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^3 \Phi_{n,2}^3 - \sum_{n=1}^N N_{mn,2}^3 \Psi_{n,2}^3 = 0, \tag{186}$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^3 \Phi_{n,2}^3 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,2}^3 - \delta_{mn,2}] \Psi_{n,2}^3 \\
 & - f_{34} \sum_{n=1}^N L_{mn,3}^4 \Phi_{n,3}^4 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,3}^4 - \delta_{mn,3}] \Psi_{n,3}^4 = 0,
 \end{aligned} \tag{187}$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,3}^4 \Phi_{n,3}^4 - \sum_{n=1}^N N_{mn,3}^4 \Psi_{n,3}^4 + f_{45} \sum_{n=1}^N L_{mn,4}^4 \Phi_{n,4}^5 - \sum_{n=1}^N N_{mn,4}^4 \Psi_{n,4}^5 = 0, \quad (188)$$

$$- \sum_{n=1}^N L_{mn,4}^5 \Phi_{n,4}^5 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,4}^5 - \delta_{mn,4}] \Psi_{n,4}^5 = 0, \quad (189)$$

constituyendo así un sistema lineal e inhomógeno de ecuaciones de rango $8N \times 8N$. El cual se puede reescribir de manera matricial con 64 entradas de $N \times N$, de la siguiente forma:

$$\mathbb{M} = \begin{bmatrix} -f_{12}L_{11}^1 & N_{11}^1 - \delta_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{11}^2 & -N_{11}^2 & f_{23}L_{12}^2 & -N_{12}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{21}^2 & -N_{21}^2 & f_{23}L_{22}^2 & -N_{22}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -L_{22}^3 & N_{22}^3 - \delta_{22} & -f_{34}L_{23}^3 & N_{23}^3 - \delta_{23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -L_{32}^3 & N_{32}^3 - \delta_{32} & -f_{34}L_{33}^3 & N_{33}^3 - \delta_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & L_{33}^4 & -N_{33}^4 & f_{45}L_{34}^4 & -N_{34}^4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & L_{43}^4 & -N_{43}^4 & f_{45}L_{44}^4 & -N_{44}^4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -L_{44}^5 & N_{44}^5 - \delta_{44} \end{bmatrix}. \quad (190)$$

III.2.3. Sistema de multicapas con i interfaces

De esta manera es posible escribir una forma general para un sistema multicapas de i interfaces, en las cuales se debe tener en consideración si se cuenta con una i par o impar.

Para i par

Tenemos las siguientes ecuaciones integrodiferenciales considerando los contornos Γ_{i+1} de la Fig. 18:

$$\Psi_1(\mathbf{r}) + \Psi_{inc}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_1} \left[G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_1(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (191)$$

$$0 = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_2} \left[G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_2(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (192)$$

$$\dots \quad (193)$$

$$0 = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_i} \left[G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_i(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_i(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (194)$$

$$\Psi_{i+1}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_{i+1}} \left[G_{i+1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_{i+1}(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_{i+1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_{i+1}(\mathbf{r}') \right] ds' \quad (195)$$

que en términos de las sumatorias y usando las Ecs. (169-170), el sistema de ecuaciones

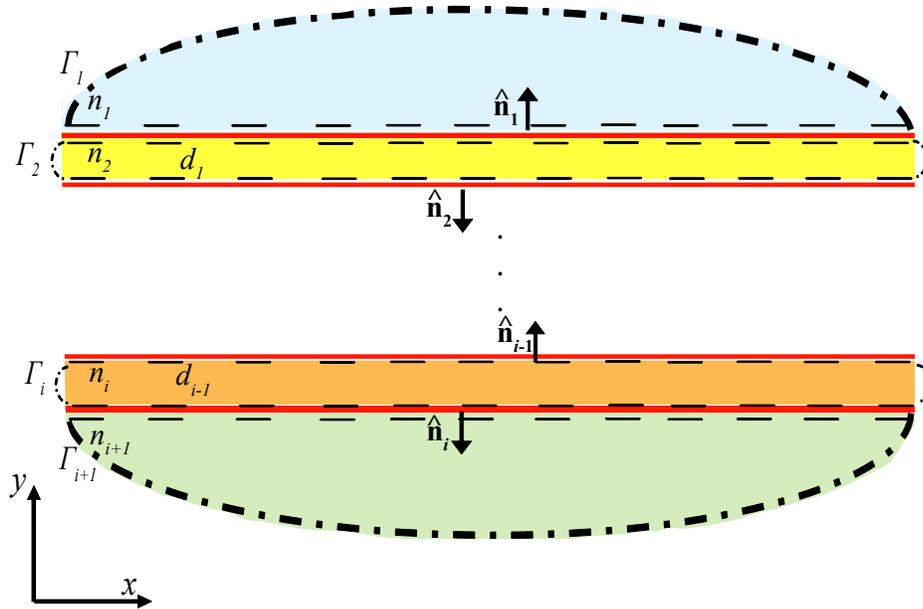


Figura 18. Un sistema de multicapas de i interfaces siendo n_l y Γ_l ($l = 1, 2, 3, \dots, i + 1$), que representan los índices de refracción y los contornos de las superficies, respectivamente.

anterior se reescribe como:

$$-f_{12} \sum_{n=1}^N L_{mn,1}^1 \Phi_{n,1}^2 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,1}^1 - \delta_{mn,1}] \Psi_{n,1}^2 = \Psi_{inc}, \quad (196)$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,1}^2 \Phi_{n,1}^2 - \sum_{n=1}^N N_{mn,1}^2 \Psi_{n,1}^2 + f_{23} \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^2 \Phi_{n,2}^3 - \sum_{n=1}^N N_{mn,2}^2 \Psi_{n,2}^3 = 0, \quad (197)$$

...

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,i-1}^i \Phi_{n,i-1}^i - \sum_{n=1}^N N_{mn,i-1}^i \Psi_{n,i-1}^i + f_{ii+1} \sum_{n=1}^N L_{mn,i}^i \Phi_{n,i}^{i+1} - \sum_{n=1}^N N_{mn,i}^i \Psi_{n,i}^{i+1} = 0, \quad (198)$$

$$- \sum_{n=1}^N L_{mn,i}^{i+1} \Phi_{n,i}^{i+1} + \sum_{n=1}^N [N_{mn,i}^{i+1} - \delta_{mn,i}] \Psi_{n,i}^{i+1} = 0. \quad (199)$$

Para determinar las fuentes cada ecuación se evalúa en todos los puntos del contorno constituyendo así un sistema lineal e inhomógeno de ecuaciones de rango $2iN \times 2iN$.

El cual se puede reescribir de manera matricial con $2i \times 2i$ entradas de tamaño $N \times N$:

$$\mathbb{M} = \begin{bmatrix} -f_{12}L_{11}^1 & N_{11}^1 - \delta_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{11}^2 & -N_{11}^2 & f_{23}L_{12}^2 & -N_{12}^2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{21}^2 & -N_{21}^2 & f_{23}L_{22}^2 & -N_{22}^2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & L_{i-1i-1}^i & -N_{i-1i-1}^i & f_{ii+1}L_{i-1i}^i & -N_{i-1i}^i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & L_{ii-1}^i & -N_{ii-1}^i & f_{ii+1}L_{ii}^i & -N_{ii}^i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -L_{ii}^{i+1} & N_{ii}^{i+1} - \delta_{ii} \end{bmatrix}. \quad (200)$$

Para simplificar la notación matricial, las submatrices $\mathbb{A}_{uo}^l = \mathbb{A}_{m,u,n,o}^l$ denotan el elemento A evaluado en el punto m del contorno Γ_u de observador, y el punto n en el contorno Γ_o de integración para el medio l .

Para i impar

Tenemos las siguientes ecuaciones integrodiferenciales sobre los contornos Γ_{i+1} mostrados en la Fig. 19:

$$\Psi_1(\mathbf{r}) + \Psi_{inc}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_1} \left[G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_1(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (201)$$

$$0 = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_2} \left[G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_2(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (202)$$

$$\dots \quad (203)$$

$$\Psi_l(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_i} \left[G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_i(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_i(\mathbf{r}') \right] ds', \quad (204)$$

$$0 = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_{i+1}} \left[G_{i+1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_{i+1}(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_{i+1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_{i+1}(\mathbf{r}') \right] ds' \quad (205)$$

que en términos de las sumatorias y usando las condiciones de frontera de las Ecs.

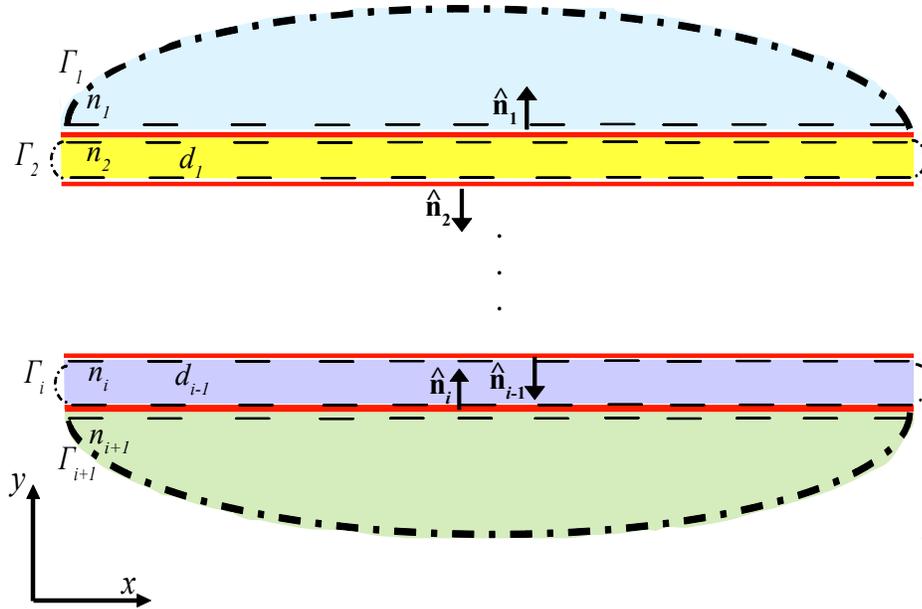


Figura 19. Un sistema de multicapas de i interfaces siendo n_l y Γ_l ($l = 1, 2, 3, \dots, i + 1$), que representan los índices de refracción y los contornos de las superficies, respectivamente.

(169-170), tenemos:

$$-f_{12} \sum_{n=1}^N L_{mn,1}^1 \Phi_{n,1}^2 + \sum_{n=1}^N [N_{mn,1}^1 - \delta_{mn,1}] \Psi_{n,1}^2 = \Psi_{inc}, \quad (206)$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,1}^2 \Phi_{n,1}^2 - \sum_{n=1}^N N_{mn,1}^2 \Psi_{n,1}^2 + f_{23} \sum_{n=1}^N L_{mn,2}^2 \Phi_{n,2}^3 - \sum_{n=1}^N N_{mn,2}^2 \Psi_{n,2}^3 = 0, \quad (207)$$

...

$$- \sum_{n=1}^N L_{mn,i-1}^i \Phi_{n,i-1}^i + \sum_{n=1}^N [N_{mn,i-1}^i - \delta_{mn,i-1}] \Psi_{n,i-1}^i$$

$$- f_{ii+1} \sum_{n=1}^N L_{mn,i}^i \Phi_{n,i}^{i+1} + \sum_{n=1}^N [N_{mn,i}^i - \delta_{mn,i}] \Psi_{n,i}^{i+1} = 0, \quad (209)$$

$$\sum_{n=1}^N L_{mn,i}^{i+1} \Phi_{n,i}^{i+1} - \sum_{n=1}^N N_{mn,i}^{i+1} \Psi_{n,i}^{i+1} = 0. \quad (210)$$

Similarmente para determinar las fuentes cada ecuación se evalúa en todos los puntos del contorno constituyendo así un sistema lineal e inhomógeno de ecuaciones de rango

la interfaz sea el semiancho de g . Este parámetro debe ser menor que la longitud de la interfaz L para evitar efectos de borde, ya que el sistema debe ser finito (ver Fig. (20)). Para mayor detalle ver la Ref. Pérez *et al.* (2009).

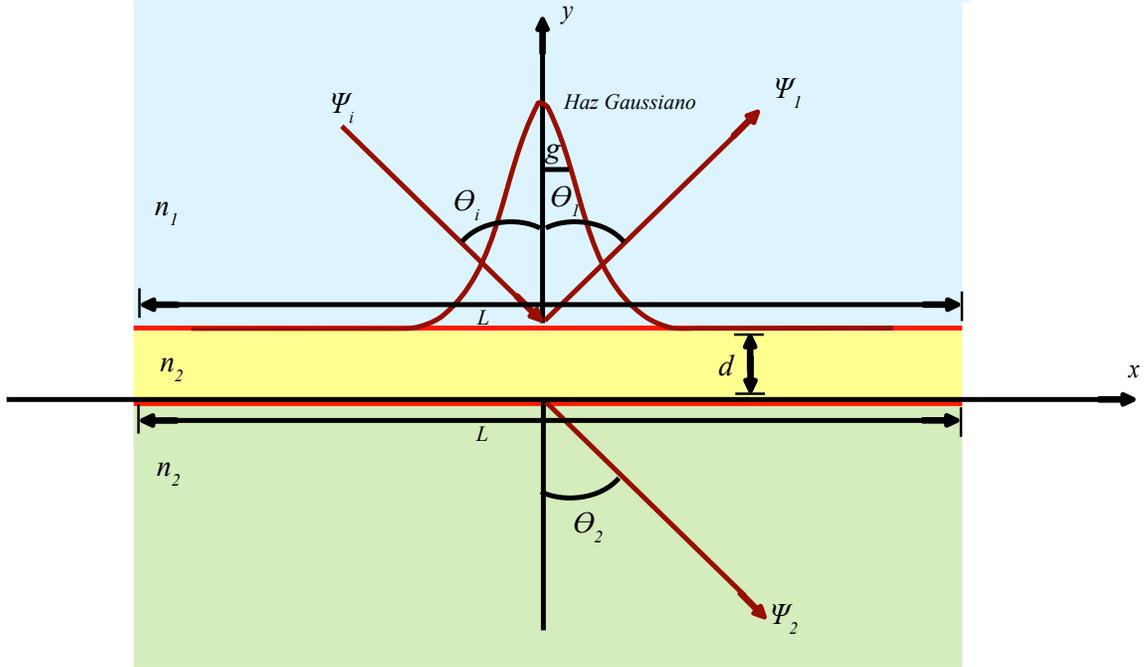


Figura 20. Esquema de un sistema con una película de espesor d . La longitud del sistema en la dirección x es de L . El semiancho del haz Gaussiano incidente es g . El ángulo incidente es θ_i , para la función de onda Ψ_i , y los ángulos de esparcimiento son θ_1 y θ_2 (para reflexión y transmisión) para las respectivas funciones de onda Ψ_1 y Ψ_2 .

Para describir un haz de este tipo, se propone una forma funcional del campo incidente en términos de su espectro angular $A(q, k_1)$ de la siguiente manera:

$$f(x, y) = \int_{-n_1(\frac{\omega}{c})}^{n_1(\frac{\omega}{c})} \frac{1}{2\pi} A(q, k_1) e^{iqx - i\alpha_0(q)(y)} dq, \quad (212)$$

donde $\alpha_0(q) = [(n_0(\frac{\omega}{c}))^2 - q^2]^{1/2}$, con $\text{Re}\{\alpha_0(q)\} > 0$ e $\text{Im}\{\alpha_0(q)\} > 0$. Por consiguiente, el campo incidente puede ser escrito como

$$\Psi_i(x, y) = \Psi_0 f(x, y), \quad (213)$$

donde Ψ_0 es una constante con las unidades apropiadas. En este caso, para un haz Gaussiano se propone la función

$$A(q, k_1) = \sqrt{\pi} g e^{-\frac{g^2(q-k_1)^2}{4} + i\alpha_0(q)d}. \quad (214)$$

Sustituyendo la Ec. (214) en la Ec. (212) y evaluando en $y = d$,

$$\Psi_i(x, d) = \Psi_0 \int_{-n_1(\frac{\omega}{c})}^{n_1(\frac{\omega}{c})} \frac{\sqrt{\pi}}{2\pi} g e^{-\frac{g^2(q-k_1)^2}{4}} e^{iqx} dq, \quad (215)$$

se obtiene el campo incidente sobre dicho plano, es decir,

$$\Psi_i(x, d) = \Psi_0 e^{ik_1 x} e^{-x^2/g^2}. \quad (216)$$

El parámetro $k_1 = n_1(\frac{\omega}{c}) \sin(\theta_i)$, donde θ_i representa el ángulo de incidencia. Esto muestra que sobre el plano $y = d$ el campo incidente tiene una modulación Gaussiana y una fase que es la de una onda plana con un ángulo de incidencia θ_i .

III.4. Potencia incidente

Para calcular el coeficiente de reflexión diferencial, el cual representa la fracción de energía incidente sobre una superficie que es esparcida por unidad de ángulo, se necesita calcular el flujo incidente total y el flujo esparcido total. Lo cual se obtiene del vector de Poynting.

Para el caso de la polarización s, de la Ec. (48) se tiene que la componente del vector de Poynting a lo largo del eje y está dada por

$$S_y = \frac{1}{2} \text{Re}\{E_z H_x^*\}, \quad (217)$$

o bien, en términos del campo eléctrico,

$$S_y = \frac{1}{2\omega\mu} \text{Re}\left\{-E_z \left(\frac{\partial E_z}{\partial y}\right)^*\right\}. \quad (218)$$

Siguiendo el mismo procedimiento para el caso de la polarización p, la componente del vector de Poynting es

$$S_y = \frac{1}{2\omega\varepsilon} \operatorname{Re} \left\{ \frac{\partial H_x}{\partial y} H_x^* \right\}. \quad (219)$$

Ahora, de la ecuación de campo incidente, dada por

$$\Psi_i(x, y) = \Psi_0 \int_{-n_0(\frac{\omega}{c})}^{n_0(\frac{\omega}{c})} \frac{\sqrt{\pi}}{2\pi} g e^{-\frac{g^2(q-k_1)^2}{4}} e^{iqx+i\alpha_0(q)(d-y)} dq, \quad (220)$$

se tiene la derivada del campo incidente

$$\frac{\partial \Psi_i(x, y)}{\partial y} = -i\alpha_0(k_1) \Psi_i(x, y). \quad (221)$$

En este punto, se ha puesto que la exponencial en el integrando es relativamente angosta y que está centrada en $q = k_1$, de manera que se puede considerar que $\alpha_0(k_1)$ es una constante sobre el rango en el cual el integrando posee un valor significativo. Al evaluar la derivada del campo incidente en $y = d$, obtenemos la siguiente expresión

$$\left. \frac{\partial \Psi_i(x, y)}{\partial y} \right|_{y=d} = -i\alpha_0(k_1) \Psi_i(x, d). \quad (222)$$

donde tenemos $\Psi_i(x, d)$ de la Ec. (216).

Así, para la polarización s se tiene que

$$|S_y|_{y=d} = \frac{1}{2\omega\mu_1} \alpha_0(k_1) |\Psi_i(x, d)|^2, \quad (223)$$

y para la polarización p

$$|S_y|_{y=d} = \frac{1}{2\omega\varepsilon_1} \alpha_0(k_1) |\Psi_i(x, d)|^2. \quad (224)$$

De esta manera, en general se puede escribir la componente y del vector de Poynting como

$$|S_y|_{y=d} = \frac{1}{2\omega\rho} \alpha_0(k_1) |\Psi_i(x, d)|^2, \quad (225)$$

donde $\rho = \varepsilon_1$ para la polarización p, y $\rho = \mu_1$ para la polarización s.

Para obtener el resultado buscado, es necesario integrar sobre un área específica. El haz está confinado a lo largo de x , con límites de integración desde $-L/2$ hasta $L/2$.

Entonces, la potencia incidente en un área particular $L_x L_z$ es

$$\begin{aligned} P_i(k_1) &= \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_z/2}^{L_z/2} |S_y|_{y=d} dz dx, \\ &= \frac{1}{2\omega\rho} \alpha_0(k_1) L_z \int_{-L_x/2}^{L_x/2} |\Psi_i(x, d)|^2, \end{aligned} \quad (226)$$

y usando la expresión de $\Psi_i(x, d)$ (Ec. (216)) reducimos la expresión a

$$P_i(k_1) = \frac{1}{2\omega\rho} \alpha_0(k_1) L_z |\Psi_0|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} g, \quad (227)$$

que es la potencia incidente al sistema de la Fig. 20.

Dado que $k_1 = n_1 \left(\frac{\omega}{c}\right) \sin(\theta_i)$, entonces

$$\begin{aligned} \alpha_0(k_1) &= [(k_1)^2 - (k_1 \sin(\theta_i))^2]^{1/2}, \\ &= k_1 [1 - \sin^2(\theta_i)], \\ &= k_1 \cos \theta_i, \end{aligned} \quad (228)$$

donde si consideramos la Ec. (228) y $|\Psi_0|^2 = 1$, entonces la Ec. (227) se transforma en

$$P_i(k_1) = \frac{1}{2\omega\rho} k_1 \cos(\theta_i) L_z \sqrt{\frac{\pi}{2}} g. \quad (229)$$

Así, para polarización s tenemos que:

$$\begin{aligned} P_i^s &= \frac{n_1 \left(\frac{\omega}{c}\right) \cos(\theta_i)}{2\omega\mu_1} L_z \sqrt{\frac{\pi}{2}} g, \\ &= \frac{n_1 \cos(\theta_i)}{4c\mu_1} L_z \sqrt{2\pi} g, \end{aligned} \quad (230)$$

y para polarización p,

$$P_i^p = \frac{n_1 \cos(\theta_i)}{4c\varepsilon_1} L_z \sqrt{2\pi} g. \quad (231)$$

III.5. Potencia esparcida

Se puede obtener el diferencial de la reflectancia asociada (ver Puente Díaz (2017)) para polarización s , la cual está dada por

$$\begin{aligned} dR(\theta_s) &\equiv \frac{P_R}{P_i^s} = \frac{\frac{n_1 L_z}{16\pi k_1 \mu_1 c} |\sigma_R(\theta_s)|^2 \Delta\theta_s}{\frac{n_1 \cos(\theta_i)}{4c\mu_1} L_z \sqrt{2\pi g}}, \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_1 \cos(\theta_i)} |\sigma_R(\theta_s)|^2 \Delta\theta_s, \end{aligned} \quad (232)$$

donde P_R denota la potencia esparcida de reflexión y $\sigma_R(\theta_s)$ es la sección eficaz de esparcimiento para R definida como

$$\sigma_R(\theta_s) = \Delta s \sum_{n=1}^N [ik_1(y'_n \sin(\theta_s) - x'_n \cos(\theta_s)) \Psi_n^1 - \Phi_n^1] e^{-ik_1(x_n \sin(\theta_s) - y_n \cos(\theta_s))}. \quad (233)$$

Al integrar la Ec. (232) en el intervalo de $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$, se tiene que la reflectancia es,

$$R(\theta_s) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_1 \cos(\theta_i)} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sigma_R(\theta_s)|^2 d\theta_s. \quad (234)$$

Por otro lado, el diferencial de transmitancia es

$$\begin{aligned} dT(\theta_s) &\equiv \frac{P_T}{P_i^s} = \frac{\frac{n_3 L_z}{16\pi k_3 \mu_3 c} |\sigma_T(\theta_s)|^2 \Delta\theta_s}{\frac{n_1 \cos(\theta_i)}{4c\mu_1} L_z \sqrt{2\pi g}}, \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} \left(\frac{\mu_3}{\mu_1}\right) \left(\frac{n_1}{n_3}\right) g k_4 \cos(\theta_i)} |\sigma_T(\theta_s)|^2 \Delta\theta_s, \end{aligned} \quad (235)$$

donde el subíndice 3 se está usando para denotar las propiedades del medio de transmisión en el sistema de la Fig. 20. En la Ec. (235), P_T denota la potencia esparcida de transmisión y $\sigma_T(\theta_s)$ es la sección eficaz de esparcimiento para T definida como

$$\sigma_T(\theta_s) = \Delta s \sum_{n=1}^N [ik_1(y'_n \sin(\theta_s) + x'_n \cos(\theta_s)) \Psi_n^1 - \Phi_n^1] e^{-ik_1(x_n \sin(\theta_s) + y_n \cos(\theta_s))}. \quad (236)$$

Integrando la Ec. (235) sobre el intervalo de $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$, se obtiene la transmitancia del sistema,

$$T(\theta_s) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} \left(\frac{\mu_3}{\mu_1}\right) \left(\frac{n_1}{n_3}\right) g k_3 \cos(\theta_i)} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sigma_T(\theta_s)|^2 d\theta_s. \quad (237)$$

Siguiendo el mismo proceso de la polarización s, tenemos para la polarización p las expresiones para la reflectancia y transmitancia:

$$R(\theta_s) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_1 \cos(\theta_i)} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sigma_R(\theta_s)|^2 d\theta_s \quad (238)$$

y

$$T(\theta_s) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} \left(\frac{n_3}{n_1}\right) g k_3 \cos(\theta_i)} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sigma_T(\theta_s)|^2 d\theta_s. \quad (239)$$

Cabe recordar que dichas expresiones, en ambas polarizaciones, deben a su vez obedecer la ley conservación de la energía dada por $R + T = 1$ cuando el sistema no tiene absorción.

III.6. Verificación del Método de la Ecuación Integral

Con la finalidad de verificar el funcionamiento del método de la ecuación integral en sistemas de multicapas finitos, se analizarán los sistemas más simples de 1, 2 y 3 interfaces entre medios dieléctricos y para medios metálicos de 1 y 2 interfaces. Estos se utilizarán debido a su simplicidad y a que se pueden comparar con un método completamente analítico resultante de las ecuaciones de Fresnel (TMM) mostradas en la Sec. (2.2).

III.6.1. Respuesta óptica de sistemas de multicapas dieléctricas de 1, 2 y 3 interfaces

La Fig. 21 muestra los resultados obtenidos del cálculo de la reflectancia y transmitancia como función del ángulo de incidencia para un haz de luz incidente (onda Gaussiana en IEM y onda plana en TMM), con longitud de onda $\lambda = 1.0 \mu\text{m}$ tanto para la polarización

s como para la p. En la Fig. 21 las leyendas de R_s y R_p corresponden a la reflectancia para la polarización s y p, respectivamente. Asimismo T_s y T_p la transmitancias para ambas polarizaciones. Los perfiles de los tres sistemas de multicapas están formados

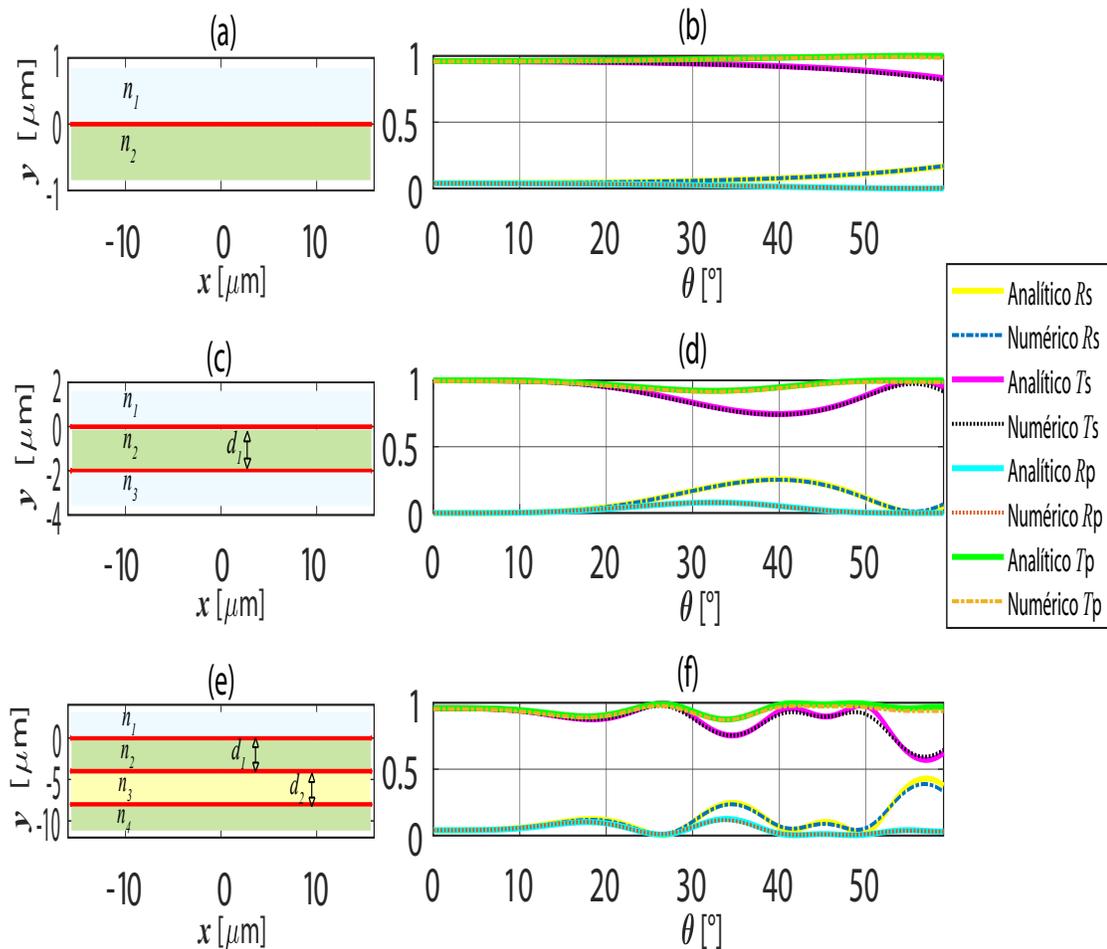


Figura 21. Perfiles de tres sistemas formados por: (a) dos medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire) y $n_2 = 1.5$ (vidrio) separados por una interfaz de longitud $L = 10\pi \mu\text{m}$; (c) tres medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 1.5$ (vidrio) y $n_3 = 1.0$ (aire) con espesor de la capa de en medio $d = 2.0 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces de $L = 10\pi \mu\text{m}$; (e) cuatro medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 1.5$ (vidrio), $n_3 = 2.0$ (Zircón) y $n_4 = 1.5$ (vidrio) con espesores de las capas de $d_1 = 2.0 \mu\text{m}$ y $d_2 = 4.0 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces $L = 10\pi \mu\text{m}$. (b), (d) y (f) Reflectancia (R) y transmitancia (T) obtenidas por los métodos numérico (IEM) y analítico (TMM) de los 3 sistemas de multicapas con medios dieléctricos para las polarizaciones s y p. Los 3 sistemas están iluminados con un haz Gaussiano de longitud de onda $\lambda = 1.0 \mu\text{m}$.

de la siguiente forma: dos medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire) y $n_2 = 1.5$

(vidrio) separados por una interfaz de longitud $L = 10\pi \mu\text{m}$ mostrados en la Fig. 21(a); tres medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 1.5$ (vidrio) y $n_3 = 1.0$ (aire) con espesor de la capa de en medio $d_1 = 2.0 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces de $L = 10\pi \mu\text{m}$ (Fig. 21(c)); cuatro medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 1.5$ (vidrio), $n_3 = 2.0$ (Zircón) y $n_4 = 1.5$ (vidrio) con espesores de las capas de $d_1 = d_2 = 4.0 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces $L = 10\pi \mu\text{m}$ (Fig. 21(e)). En el primer caso se consideró un semi ancho del haz Gaussiano de $g = L/6$ y para los otros dos casos con $g = L/3$.

En las Figs. 21(b), (d) y (f) se muestran los resultados numéricos y analíticos de los 3 sistemas de multicapas con medios dieléctricos mediante el IEM y el TMM, respectivamente. En todos los casos se observa una buena concordancia con los resultados, lo cual da pie a que el método numérico desarrollado funciona de manera precisa.

III.6.2. Respuesta óptica de sistemas de multicapas metálicas de 1 y 2 interfaces

La Fig. 22 muestra los resultados obtenidos del cálculo de la reflectancia como función del ángulo de incidencia para un haz de luz incidente, con $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$ tanto para la polarización s como para la p. En la Fig. 22 las leyendas de R_s y R_p corresponden a la reflectancia para la polarización s y p, respectivamente. Los perfiles de los dos sistemas de multicapas están formados de la siguiente forma: dos medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire) y $n_2 = 0.14374 + 3.8097i$ (plata) separados por una interfaz de longitud $L = 12\pi \mu\text{m}$ mostrados en la Fig. 22(a); tres medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 0.14374 + 3.8097i$ (plata) y $n_3 = 1.0$ (aire) con espesor de la capa de en medio $d_1 = 0.01 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces de $L = 12\pi \mu\text{m}$ (Fig. 22(c)). Para los dos casos se consideró un semi ancho del haz Gaussiano de $g = \frac{80}{2\pi}\lambda$.

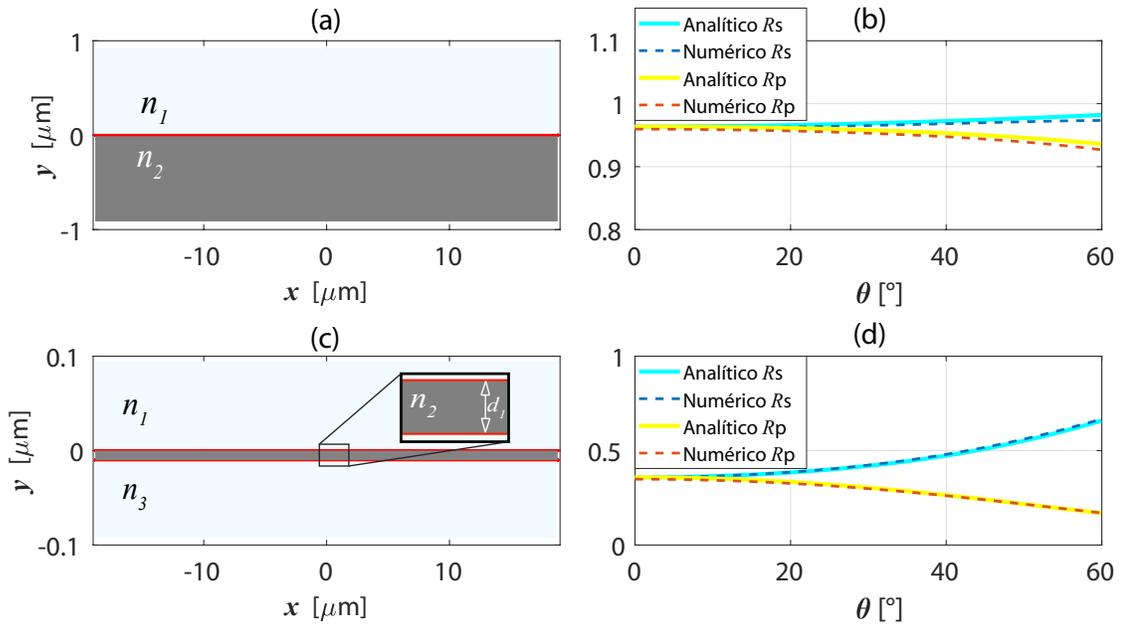


Figura 22. Perfiles de dos sistemas de multicapas formados de la siguiente forma: (a) dos medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire) y $n_2 = 0.14374 + 3.8097i$ (plata) separados por una interfaz de longitud $L = 12\pi \mu\text{m}$; (c) tres medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$ (aire), $n_2 = 0.14374 + 3.8097i$ (plata) y $n_3 = 1.0$ (aire) con espesor de la capa de en medio $d = 0.01 \mu\text{m}$ y longitudes de las interfaces de $L = 12\pi \mu\text{m}$. (b) y (d) Reflectancia (R) y transmitancia (T) obtenidas por los métodos numérico (IEM) y analítico (TMM) de los 2 sistemas de multicapas con medios dieléctricos para las polarizaciones s y p. Ambos sistemas iluminados con un haz Gaussiano de longitud de onda de $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$.

En las Figs. 22(b) y (d) se muestran los resultados numéricos y analíticos de los 2 sistemas de multicapas con medios metálicos mediante el IEM y el TMM, respectivamente. En todos los casos se observa una buena concordancia con los resultados, lo cual da pie a que el método numérico desarrollado funciona de manera precisa e inclusive añadiendo estos medios metálicos con absorción. En este caso se mostró únicamente la reflectancia, debido a que, es la respuesta de la luz de interés para estos sistemas.

Capítulo IV

RESULTADOS

En este capítulo se presenta una serie de aplicaciones a los sistemas de películas delgadas en el uso de medios estrictamente dieléctricos como es el caso de sistemas altamente reflejantes, sistemas antireflejantes y filtros de borde. Así como también la configuración típica de Kretschmann formada por una película delgada metálica y un medio dieléctrico para lograr una reflexión total atenuada debida a la excitación de un plasmón polaritón superficial (SPP). Con esta plataforma se estudia las resonancias del plasmón superficial (SPRs) mediante el cálculo de la reflectancia y/o transmitancia como función del ángulo de incidencia, del espesor de las películas delgadas o de la longitud de onda. En los diferentes sistemas considerados se tomó en cuenta el estado de polarización de la onda electromagnética incidente (s o p) de acuerdo a sus condiciones del problema. Así como la iluminación del sistema con un haz Gaussiano apropiado para evitar los efectos de borde en las interfaces de longitud finita. En el caso del sistema de Kretschmann para obtener la reflectancia como función de la longitud de onda y el espesor de las películas se tuvo que utilizar la programación en paralelo bajo el protocolo de MPI debido a la gran cantidad de tiempo de cómputo requerido. Se mostrarán resultados de sistemas estratificados; sin embargo, es importante reiterar que la contribución de este trabajo

fue en el desarrollo de un método numérico riguroso optimizado para un sistema de multicapas dieléctricas.

IV.1. Película altamente reflejante

Se estudió un sistema de multicapas formado por 10 capas cuyas interfaces separan los medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$, $n_H = 2.1$, $n_L = 1.38$ y $n_s = 1.52$ y espesores de las películas delgadas $d_H = 0.0655 \mu\text{m}$ y $d_L = 0.0996 \mu\text{m}$, respectivamente, como se muestra en la Fig. 23. El sistema de multicapas está diseñado como

$$n_1 |(n_H n_L)^q| n_s,$$

con $q = 5$, donde se tomó en cuenta la variación de la longitud de onda desde $0.3 \mu\text{m}$

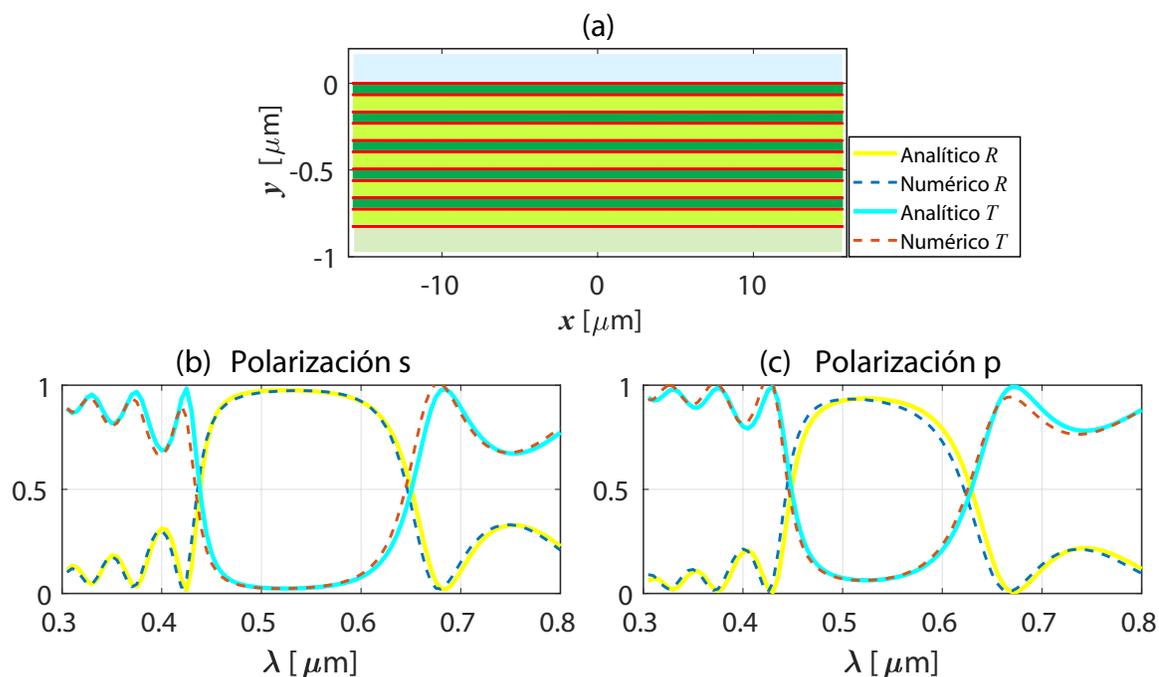


Figura 23. (a) Perfil de un sistema de películas delgadas con índices de refracción $n_1 = 1.0$, $n_H = 2.1$, $n_L = 1.38$ y $n_s = 1.52$ con espesores de $d_H = 0.0655 \mu\text{m}$ y $d_L = 0.0996 \mu\text{m}$. Reflectancia (R) y transmitancia (T) para las polarizaciones (b) s y (c) p variando la longitud de onda $\lambda \in [0.3, 0.8] \mu\text{m}$, a un ángulo de incidencia $\theta_i = 30$ usando el IEM (numérico con líneas discontinuas) y el TMM (analítico con líneas continuas).

hasta $0.8 \mu\text{m}$ en pasos de discretización de $\Delta\lambda = 0.005 \mu\text{m}$ a un ángulo de incidencia fijo $\theta_i = 30$. En la Fig. 23(a) se muestra el perfil del sistema de multicapas considerado; así como los resultados numéricos (IEM) y analíticos (TMM) de la transmitancia (T) y reflectancia (R) para las polarizaciones s (Fig. 23(b)) y p (Fig. 23(c)). Podemos observar que el método numérico tiene buena correspondencia con los resultados analíticos obtenidos. Además, se tiene que en los intervalos de la longitud de onda para $\lambda \in (0.45, 0.62) \mu\text{m}$ y $\lambda \in (0.46, 0.59) \mu\text{m}$ una alta reflectancia bajo estos diseños de películas delgadas.

La aplicación más usual de las películas altamente reflejantes es en lentes para mejorar la eficiencia de los diferentes dispositivos aumentando su reflectancia para aplicaciones de espectroscopía, microscopía y laboratorio en general; como ejemplo, se pueden usar como reflectores láser.

IV.2. Película antirreflejante

Ahora se consideró un sistema de multicapas con 4 interfaces que separan los medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$, $n_2 = 1.38$, $n_3 = 1.585$, $n_4 = 1.82$ y $n_s = 1.52$, variando la longitud de onda desde $0.44 \mu\text{m}$ hasta $1.34 \mu\text{m}$ en pasos de discretización de $\Delta\lambda = 0.01 \mu\text{m}$. En la Fig. 24(a) tenemos el perfil utilizado para el caso de la polarización s con espesores de las películas delgadas de $d_i = 0.1767 \mu\text{m}$ ($i = 1, 2, 3$). Los resultados de la reflectancia (R) y la transmitancia (T) calculados a incidencia normal ($\theta_i = 0$) son mostrados en la Fig. 24(b). Estos resultados muestran que el método integral (numérico) tiene una buena correspondencia con el método analítico; es decir, los resultados obtenidos son confiables. Analizando el gráfico a detalle podemos observar que la luz reflejada es mínima, lo cual nos indica que tenemos un sistema antirreflejante, o de igual manera si observamos la transmitancia vemos que ésta es máxima ratificando

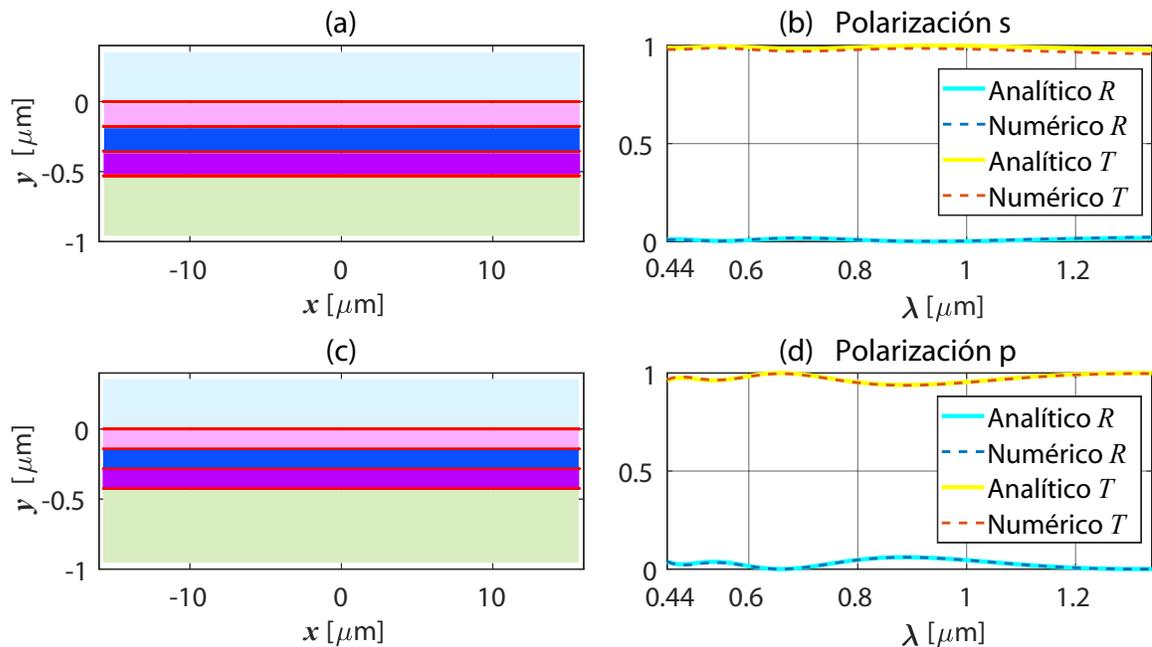


Figura 24. Perfil para un sistema de 3 capas cuyas interfaces separan los medios con índices de refracción $n_1 = 1.0$, $n_2 = 1.38$, $n_3 = 1.585$, $n_4 = 1.82$ y $n_s = 1.52$ con espesores de las capas (a) $d_j = 0.1767 \mu\text{m}$ ($j = 1, 2, 3$) y (c) $d_j = 0.1414 \mu\text{m}$ ($j = 1, 2, 3$). Reflectancia (R) y transmitancia (T) obtenidas con el IEM (numérico con líneas discontinuas) y el TMM (analítico con líneas continuas), variando la longitud de onda $\lambda \in [0.44, 1.34] \mu\text{m}$, (b) a un ángulo incidente $\theta_i = 0$ para la polarización s y (d) a un ángulo incidente $\theta_i = 59$ para la polarización p.

el hecho de tener una capa antirreflejante. Similarmente en la Fig. 24(c) se muestra el perfil utilizado para el caso de la polarización p, en el cual los espesores de las películas dieléctricas son $d_i = 0.1414 \mu\text{m}$ ($i = 1, 2, 3$). Los resultados obtenidos de R y T para este sistema iluminado al ángulo de incidencia $\theta_i = 59$ están ilustrados en la Fig. 24(d). Estos resultados numéricos son igualmente precisos al ser comparados con el método analítico e igualmente cumplen las condiciones para un revestimiento antirreflejante. Teniendo así que el IEM es confiable al momento de modelar este tipo de sistemas.

De igual manera que el caso anterior, la aplicación más usual de las capas antirreflejantes es en lentes para mejorar la eficiencia aumentando su transmisión, mejorando el contraste y eliminando cualquier imagen (fantasma) que pueda aparecer; como ejemplo,

comúnmente se utiliza en los anteojos.

IV.3. Filtros de Borde

También se estudiaron dos sistemas de multicapas con 12 interfaces que separan los medios con índices de refracción $n_1 = 1.52$, $n_H = 2.35$, $n_L = 1.35$ y $n_s = 1.0$ iluminados a incidencia normal. Aquí no se tomó distinción entre polarizaciones debido a que a incidencia normal las polarizaciones s y p se comportan de igual manera.

IV.3.1. Filtro pasa onda larga

El perfil de un sistema de multicapas diseñado como

$$n_1 \left| \frac{n_L}{2} \left(\frac{n_L}{2} n_H \frac{n_L}{2} \right)^q \frac{n_L}{2} \right| n_s,$$

con $q = 5$ y espesor $d = 0.186 \mu\text{m}$ para cada una de las capas, respectivamente, se ilustra en la Fig. 25(a). En la Fig. 25(b) se muestran los resultados de la reflectancia (R) y transmitancia (T) para la polarización s, obtenidas mediante el IEM (líneas discontinuas) y el TMM (líneas continuas) variando la longitud de onda en el intervalo de 0.61 a $1.0 \mu\text{m}$ con pasos de discretización de $\Delta\lambda = 0.01 \mu\text{m}$. Haciendo la comparación de los métodos utilizados, el método numérico es confiable ya que tiene una buena correspondencia con el método analítico. Además vemos que para $\lambda > 0.77 \mu\text{m}$ la reflectancia es mínima o bien la transmitancia es máxima. Estos resultados indican que el sistema de multicapas considerado corresponde a un filtro pasa onda larga.

Filtros de este tipo tiene una gran cantidad de aplicaciones, en campos tan variados como: interferometría, espectrometría, vídeo, láser, redes y comunicaciones, entre otros; como ejemplo, si se quieren imágenes en IR donde se desea suprimir el espectro visible entonces el filtro pasa onda larga es el indicado.

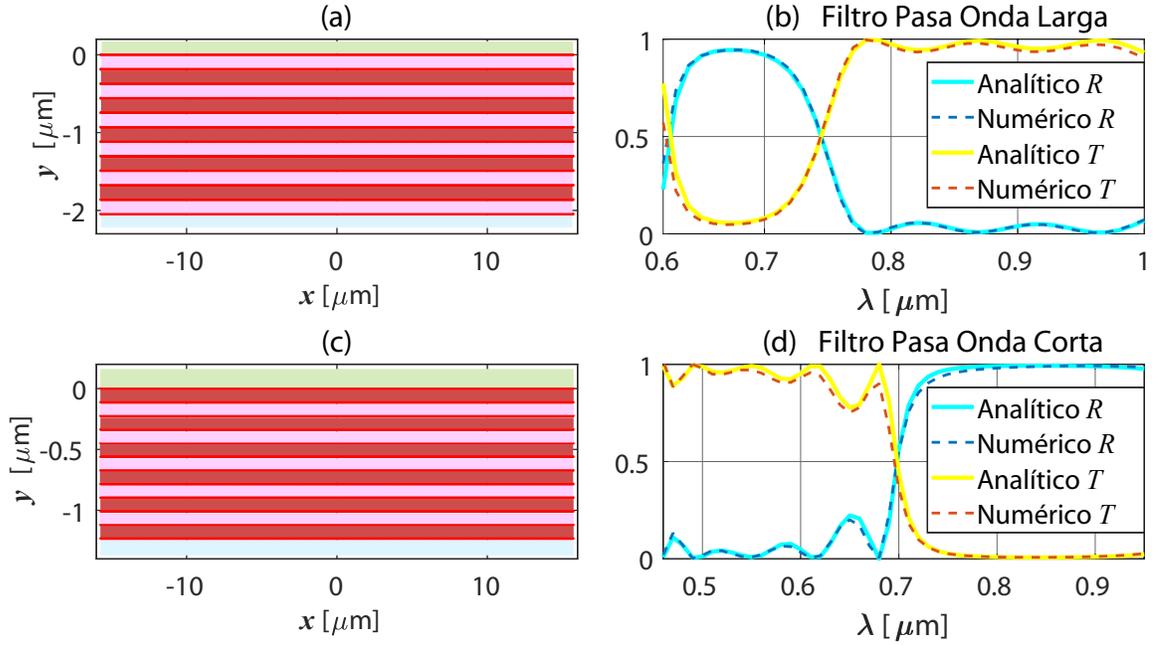


Figura 25. Perfil para un sistema de 11 capas con interfaces que separan los medios con índices de refracción $n_1 = 1.52$, $n_H = 2.35$, $n_L = 1.35$ y $n_s = 1.0$, y espesores de las películas delgadas de (a) $d = 0.186 \mu\text{m}$ y (c) $d = 0.112 \mu\text{m}$. Reflectancia (R) y transmitancia (T) usando el IEM (numérico con líneas discontinuas) y TMM (analítico con líneas continuas) para (b) un filtro pasa onda larga y (d) un filtro pasa onda corta variando la longitud de onda.

IV.3.2. Filtro pasa onda corta

Ahora se va a considerar el perfil de un sistema de películas delgadas diseñado como

$$n_1 \left| \frac{n_H}{2} \left(\frac{n_H}{2} n_L \frac{n_H}{2} \right)^q \frac{n_H}{2} \right| n_s,$$

con $q = 5$ con espesor $d = 0.112 \mu\text{m}$ para cada una de las capas ilustrado en la Fig. 25(c). En la Fig. 25 (d) se muestran los resultados de R y T variando la longitud de onda desde $0.45 \mu\text{m}$ hasta $0.95 \mu\text{m}$ en pasos de discretización de $\Delta\lambda = 0.01\mu\text{m}$. Vemos que para $\lambda < 0.68 \mu\text{m}$ tenemos que la reflectancia es mínima, lo cual corresponde a un filtro pasa onda corta. De igual forma los resultados numéricos indican que hay una buena correspondencia con los resultados analíticos, lo cual permite confiar en el IEM.

De igual manera que los filtros pasa onda larga estos tienen el mismo rango de

aplicaciones donde se pueden considerar el complemento de ellos; como ejemplo las cámaras a color necesitan un filtro de pasa onda corta porque filtra las fuentes de luz UV e IR para brindarle una imagen en color real.

IV.4. Resonancia de Plasmón Superficial

En esta sección se estudiará la respuesta óptica de la configuración típica de Kretschmann formada por un prisma con índice de refracción n_1 , una película metálica delgada con n_2 y el aire con n_3 . El prisma será considerado como una capa dieléctrica para lograr una reflexión total atenuada y así obtener la excitación de un SPP. Para estudiar las SPRs mediante los métodos numérico (IEM) y analítico (TMM) se considerarán las variaciones con respecto al ángulo de incidencia, espesor de la película delgada y la longitud de onda incidente. De esta forma se encontrarán las condiciones necesarias para la excitación del SPP para diferentes tipos de metales.

IV.4.1. Casos particulares

Primeramente, las películas delgadas se consideraron de tres metales diferentes: plata, oro y aluminio iluminadas a longitud de onda $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$. Para cada caso se tiene un ángulo específico en el cual se tiene la resonancia del SPP con un espesor de la película metálica específica. Para los medios que rodean la película metálica se consideraron los valores del índice de refracción constante, $n_1 = 1.723$ y $n_2 = 1.0$; en cambio, para cada tipo de metal las propiedades ópticas son dispersivas, por lo que fueron modeladas con el método de Lorentz-Drude descrito en la Sec. 2.3.

Plata

Primeramente vamos a considerar el caso de la película de plata con espesor $d = 0.04 \mu\text{m}$, que a partir del modelo de Lorentz-Drude, el índice de refracción es $n_2 = 0.1437 + 3.8097i$. En la Fig. 26(a), se muestra el perfil de este sistema y en la Fig. 26(b) la reflectancia (R) dada por el método numérico (IEM) y el método analítico (TMM). Los resultados muestran que el ángulo de resonancia del SPP está en $\theta = 37.19$ con ambos métodos. Así comprobamos la eficacia del método de la ecuación integral. También

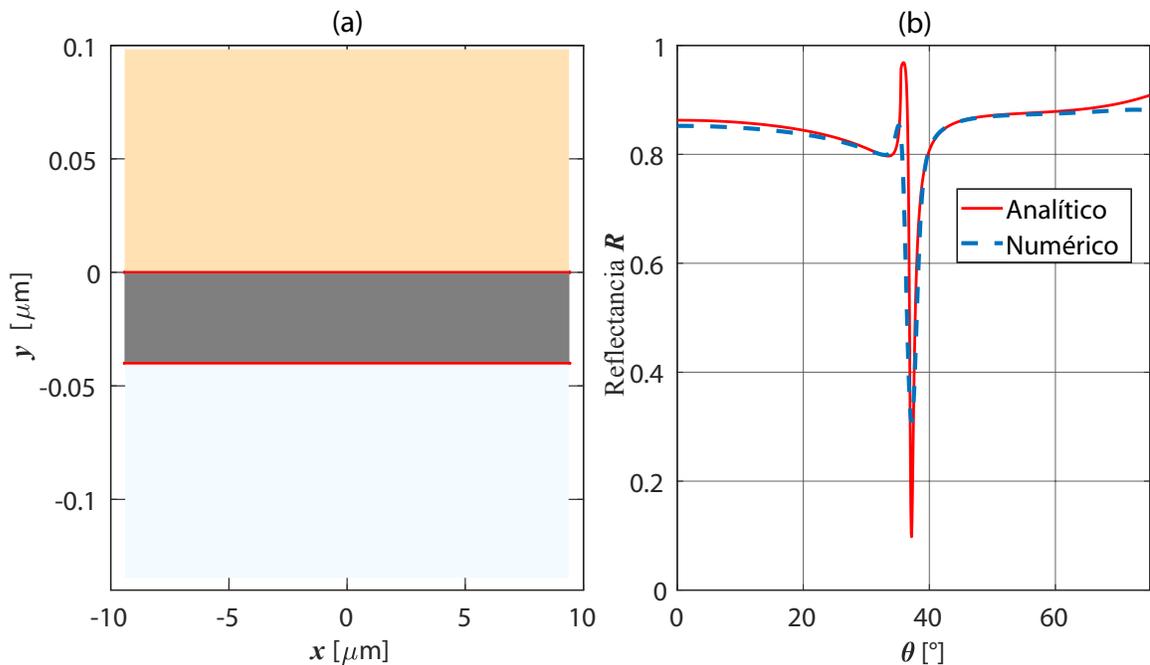


Figura 26. (a) Perfil de un sistema de Kretschmann compuesto por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 0.14374 + 3.8097i$ (plata) y $n_3 = 1.0$ y espesor de la película metálica $d = 0.04 \mu\text{m}$. (b) Reflectancia de la configuración de Kretschmann mediante los métodos numérico (IEM línea discontinua) y analítico (TMM línea continua) como función del ángulo de incidencia.

podemos observar que el mínimo obtenido por el método numérico es mayor que el analítico; esto es debido a que el TMM da resultados exactos en términos del modelo de superficies planas, pero el método integral discretiza los contornos y entonces se hace una aproximación con un número finito de fuentes, lo que en realidad es un número

infinito. Esto hace que el método numérico, que aunque da buenos resultados, siempre será aproximado.

Oro

Ahora se considera el caso de la película de oro con espesor $d = 0.05 \mu\text{m}$, con un índice de refracción es $n_2 = 0.1726 + 3.4218i$. En la Fig. 27(a), se muestra el perfil de este sistema y en la Fig. 27(b) la reflectancia (R) dada por el método numérico (IEM) y el método analítico (TMM). Los resultados muestran que el ángulo de resonancia del SPP está en $\theta = 37.5$ con ambos métodos. Así reafirmamos la eficacia del método numérico y volvemos a tener el mismo comportamiento en la reflectancia con ambos métodos.

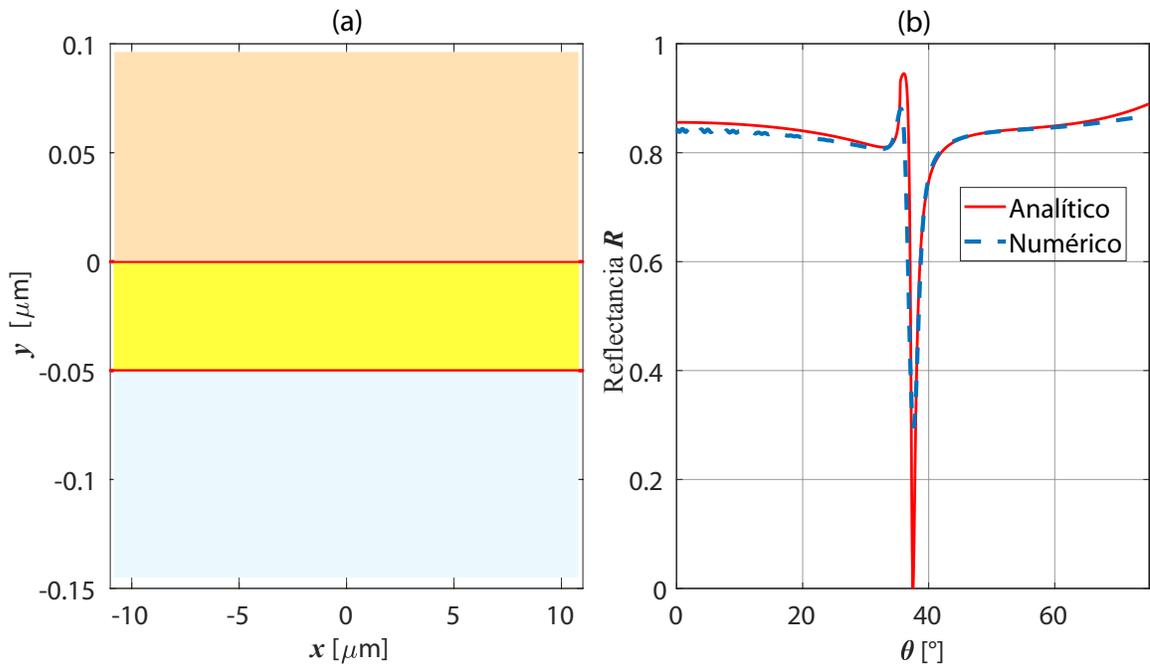


Figura 27. (a) Perfil de un sistema de Kretschmann compuesto por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 0.1726 + 3.4218i$ (oro) y $n_3 = 1.0$ y espesor de la película metálica $d = 0.05 \mu\text{m}$. (b) Reflectancia de la configuración de Kretschmann mediante los métodos numérico (IEM línea discontinua) y analítico (TMM línea continua) como función del ángulo de incidencia.

Aluminio

Como último caso particular vamos a considerar la película de aluminio con espesor $d = 0.01 \mu\text{m}$, que a partir del modelo de Lorentz-Drude, el índice de refracción es $n_2 = 1.3406 + 7.3015i$. En la Fig. 28(a), se muestra el perfil de este sistema y en la Fig. 28(b) la reflectancia (R) dada por el método numérico (IEM) y el método analítico (TMM). Los resultados muestran que el ángulo de resonancia del SPP está en $\theta = 36.5$ para el caso analítico y en $\theta = 36.81$ para el método numérico. Aquí vemos que el IEM tiene sus fortalezas y debilidades, ya que para este caso en el cual la resonancia del SPP aparece de manera abrupta ocasionando una desviación de 0.31. Esto muestra que el método requiere un comportamiento más suave y una discretización mucho más fina. De igual manera como se esperaba el valor del mínimo de la reflectancia en este ángulo de resonancia tampoco llega a ser cero para el método numérico.

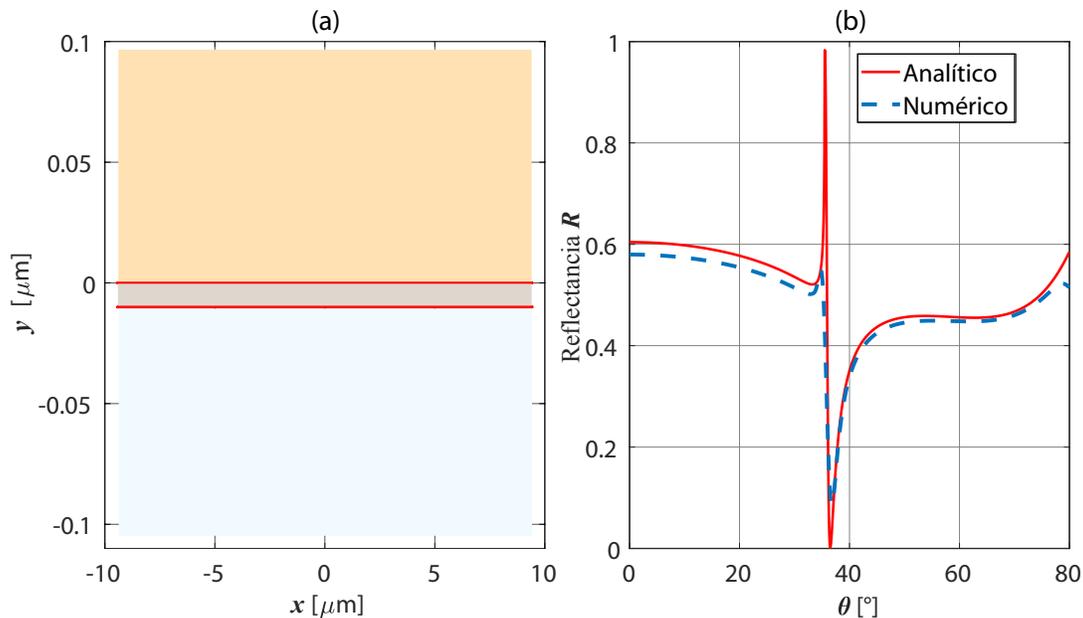


Figura 28. (a) Perfil de un sistema de Kretschmann compuesto por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 1.3406 + 7.3015i$ (aluminio) y $n_3 = 1.0$ y espesor de la película metálica $d = 0.01 \mu\text{m}$. (b) Reflectancia de la configuración de Kretschmann mediante los métodos numérico (IEM línea discontinua) y analítico (TMM línea continua) como función del ángulo de incidencia.

IV.4.2. Variación del espesor de la película metálica

Una vez que se logró estudiar la resonancia del plasmón superficial con la configuración de Kretschmann para una longitud de onda de iluminación y espesor de la película metálica particulares, es posible generalizar el problema para varios valores del espesor de la película metálica. Esto ayudará a encontrar más condiciones necesarias para lograr la excitación del SPP para el caso de una película de oro. De igual forma se utilizarán los métodos numérico (IEM) y analítico (TMM) para calcular la reflectancia variando el ángulo de incidencia y el espesor de la película delgada con una longitud de onda incidente específica. Debido a que el cálculo numérico requiere mayor tiempo de cómputo se usó la programación en paralelo bajo el protocolo de MPI FORTRAN [Pérez (2015)]. Para ello se utilizó la estación de trabajo de la FCFM, la cual tiene 2 procesadores Intel Xeon Processor 8 Cores E5-2640 (20M Cache, 2.00 GHz) con 64 GB de memoria (8 X 8GB), una tarjeta TESLA K40 con 12 GB de memoria RAM y un sistema operativo Linux CentOS 6.2 x 86_64.

El sistema de Kretschmann está compuesto por 2 interfaces que separa 3 medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 0.1726 + 3.4218i$ (oro) y $n_3 = 1.0$ (ver Fig. 27(a)), el cual es iluminado por un haz Gaussiano de longitud de onda $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$. Se hizo una variación angular del haz incidente de $\theta \in [0, 80)$ con un paso de discretización de $\Delta\theta = 0.0625$ y una variación del espesor de la película de oro de $d \in [0.005, 0.5] \mu\text{m}$ con un paso de discretización de $\Delta d = 0.005 \mu\text{m}$, para obtener las respuestas ópticas del sistema propuesto mostradas en las Figs. 29(a) con el IEM (numérico) y 29(b) con TMM (analítico). Vemos que la ubicación en la cual hay resonancia del SPP es muy específica en un rango pequeño, tanto en la variación del ángulo de incidencia como en el espesor de la película. También podemos observar que para un espesor de la película de $d > 0.1 \mu\text{m}$ ya no existe un ángulo de incidencia en el cual se tenga una resonancia,

debido a que para que exista el plasmón como dice la teoría se requiere una película delgada.

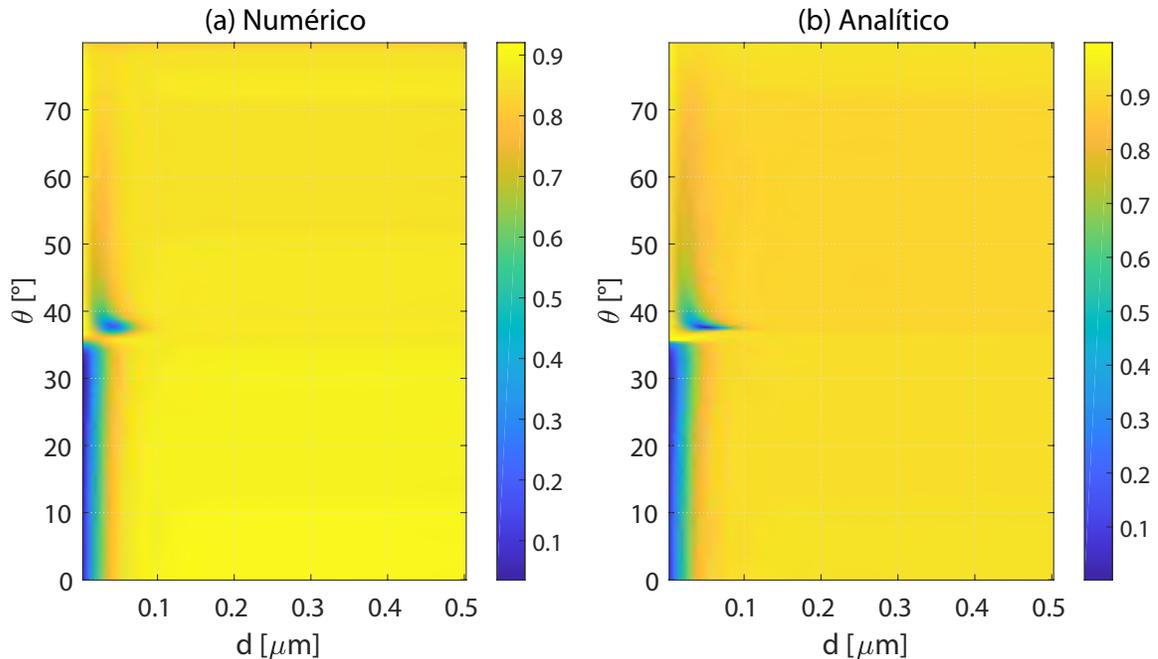


Figura 29. Reflectancia obtenida por los métodos (a) numérico (IEM) y (b) analítico (TMM) para un sistema de Kretschmann formado por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2 = 0.1726 + 3.4218i$ (oro) y $n_3 = 1.0$ con una longitud de onda fija $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia y el espesor de la película metálica.

IV.4.3. Variación de la longitud de onda

También es posible generalizar el problema para varios valores de la longitud de onda de incidencia. Esto ayudará a encontrar más condiciones necesarias para lograr la excitación del SPP para el caso de una película de plata. De igual forma se utilizarán los métodos numérico (IEM) y analítico (TMM) para calcular la reflectancia variando el ángulo de incidencia y la longitud de onda con un espesor de la película metálica específica. Debido a que el cálculo numérico también requiere mayor tiempo de cómputo se usó la programación en paralelo bajo el protocolo de MPI FORTRAN.

El sistema de Kretschmann está compuesto por 2 interfaces que separa 3 medios

con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2(\lambda)$ (plata obtenido del modelo de Lorentz-Drude) y $n_3 = 1.0$ (ver Fig. 26(a)), el cual tiene una película de plata con un espesor de $d = 0.04 \mu\text{m}$. Se hizo una variación angular del haz incidente de $\theta \in [0, 80)$ con un paso de discretización de $\Delta\theta = 0.0312$ y una variación de la longitud de onda de $\lambda \in [0.313, 0.803] \mu\text{m}$ con un paso de discretización de $\Delta\lambda = 0.01 \mu\text{m}$ del haz Gaussiano con el cual se iluminó el sistema, para obtener las respuestas ópticas del sistema propuesto mostradas en las Figs. 30(a) con el IEM (numérico) y 30(b) con TMM (analítico). Vemos que para el espesor elegido en el intervalo de la longitud de onda seleccionado, el

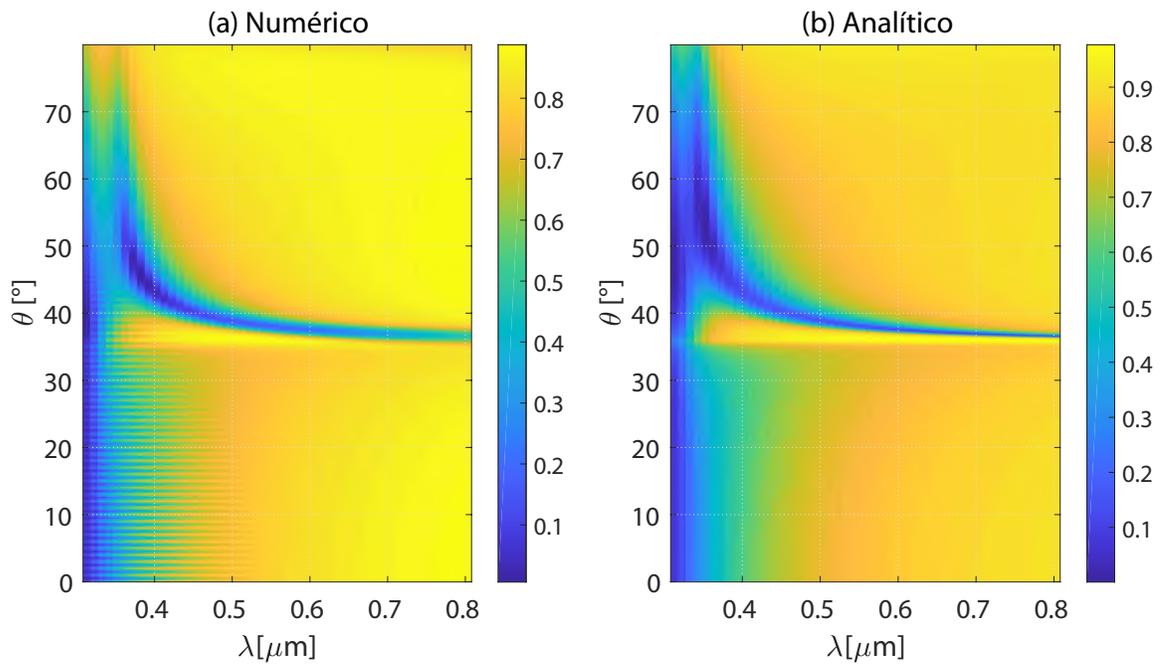


Figura 30. Reflectancia obtenida por los métodos (a) numérico (IEM) y (b) analítico (TMM) para un sistema de Kretschmann formado por los medios con índices de refracción $n_1 = 1.723$, $n_2(\lambda)$ (plata) y $n_3 = 1.0$ con un espesor de la película metálica fijo $d = 0.04 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia y la longitud de onda.

ángulo del haz incidente en el cual se encuentra la resonancia del SPP corresponde a un intervalo angular de 5 que conforme la longitud de onda crece se vuelve más pequeño hasta ser menor a 1. Además se tiene que conforme el intervalo angular para una λ particular se vuelve más pequeño, el método numérico empieza a fallar, debido a que

estos mínimos son muy abruptos y el método requiere un comportamiento más suave y una discretización más fina como se había mencionado anteriormente. Sin embargo, los resultados con el IEM han sido confiables aún para sistemas complejos como fue la configuración de Kretschmann para la excitación de plasmones superficiales.

Capítulo V

CONCLUSIONES

En este capítulo se da una visión integral del trabajo desarrollado, presentando un breve resumen y una discusión comparativa entre los resultados numéricos y analíticos obtenidos con el IEM y el TMM. Posteriormente, con base en los resultados obtenidos, se enuncian las conclusiones más importantes del trabajo.

En este trabajo se ha realizado un estudio teórico de la propagación de la luz en diferentes sistemas de multicapas construidos con dieléctricos y metales. Motivado en gran parte por el desarrollo del IEM para un sistema arbitrario de capas. En particular, en el cálculo numérico de las resonancias plasmónicas mediante la configuración de Kretschmann que podrán ser comparadas con resultados experimentales.

Para abordar el problema de interés, desarrollamos e implementamos dos técnicas numéricas. La primera se conoce como el método de la ecuación integral (IEM), que parte del segundo teorema integral de Green para obtener un par de ecuaciones integrodiferenciales acopladas que involucran, como incógnitas, al campo y su derivada normal evaluados en las fronteras o superficies involucradas. La discretización del sistema resulta en una ecuación matricial cuya solución determina las funciones fuente, con las que se puede calcular el campo esparcido. Con este método se trata la propagación

de la luz en sistemas multicapas de medios dieléctricos y metálicos. El segundo método analítico es el de la matriz de transferencia (TMM) el cual considera interfaces infinitas plano paralelas. En esta técnica, los campos eléctricos entre diferentes interfaces se relacionan con un producto matricial construido en base a dos tipos de matrices, siendo la matriz de transmisión entre medios distintos y la matriz de propagación a través de las diferentes capas. Este método de igual manera puede tratar con los diferentes medios dieléctricos y la combinación con metales, el cual fue diseñado para tratar sistemas con interfaces plano paralelas y se utiliza como método de referencia y comparación de resultados producidos por el IEM.

Primeramente se obtuvieron resultados numéricos y analíticos de diferentes sistemas dieléctricos de multicapas con 1, 2 y 3 interfaces. Para la verificación del método numérico para ambas polarizaciones s y p se observa buena concordancia de resultados, aunque el IEM se desvía del resultado analítico particularmente a ángulos de incidencia rasantes. Ésta es una limitación intrínseca esperada. Sumado a la verificación del método numérico se consideró el sistema de multicapas con películas delgadas metálicas dando también una buena correspondencia con los resultados analíticos.

Una vez verificada la confiabilidad del IEM se estudió la respuesta óptica de diferentes sistemas de multicapas dieléctricas, modelando tres tipos de recubrimientos (altamente reflejantes y antirreflejantes) y filtros pasa onda larga y corta. Los resultados numéricos del IEM de igual forma mostraron una correspondencia muy buena con respecto al TMM, sin importar la forma de los medios incidente o transmisión y el cómo estuvieran construidas las capas.

Para estudiar las SPRs en una configuración de Kretschmann, se revisó la teoría sobre conductores metálicos mediante el modelo de Lorentz-Drude para determinar el comportamiento de la permitividad relativa de diferentes metales. Derivado de estos

resultados se determinaron los ángulos donde aparecen las SPRs con ambos métodos variando el ángulo del haz incidente. Para las películas metálicas de oro y plata, los resultados del ángulo de la SPR fueron los mismos. En cambio, para la película metálica de aluminio hubo discrepancia debido posiblemente a la falta de una mejor discretización de los contornos. Además, los resultados con el TMM mostraron que el mínimo para la reflectancia era cero y en los casos del IEM el mínimo era mayor que cero. Esto se debe a que el TMM da resultados, que en la teoría son exactos; es decir, que su error es sólo por el cálculo numérico del producto de matrices, en cambio el método integral discretiza los contornos y entonces se hace una aproximación con un número finito de fuentes lo que en realidad es un número infinito. Por otro lado, se encontró que la curva del plasmón es diferente para cada metal debido a que cada uno posee una función dieléctrica distinta.

Los tres sistemas considerados tuvieron un espesor diferente en las películas metálicas al ángulo dado de la SPR, a pesar de que los medios incidente y de transmisión son los mismos y fueron iluminados con un haz Gaussiano con la misma longitud de onda. Esta parte fue corroborada tomando en cuenta una variación del sistema sobre el espesor de la película de oro. Esto mostró que el SP está confinado en una región en donde la película tiene un espesor menor a $0.1 \mu\text{m}$ y mayor a $0.01 \mu\text{m}$. Adicionalmente, se hizo un barrido en longitud de onda y ángulo incidente en una película de plata, en donde se volvió a corroborar el hecho de que el comportamiento del ángulo de la SPR y la discretización son muy importantes; ya que la ubicación de la SPR tiende a aparecer en un intervalo angular de 5 para longitudes de onda cortas hasta llegar a un intervalo menor a un grado para longitudes de onda largas. En esta última región el IEM no funciona tan adecuadamente, debido a que en todo el sistema se mantuvo una discretización constante sobre las interfaces.

Estos resultados nos indican que el IEM es una herramienta muy importante que genera resultados muy precisos, pero que se debe tratar con cuidado para evitar errores grandes. Sin embargo, la generalización del método integral fue un éxito, ya que dio buenos resultados en todos los sistemas que propusimos. Como trabajo futuro se pretende utilizar el IEM considerando geometrías más complejas que tomen en cuenta factores físicos que intervienen en los experimentos como la micro rugosidad aleatoria debida a la estructura policristalina de los materiales. Además, con esta herramienta numérica poder diseñar sensores ópticos mediante plataformas plasmónicas que permitan realizar mediciones en tiempo real de varios parámetros físicos tales como las concentraciones de diferentes sustancias.

Apéndice A

PROGRAMA PARA SIMULAR LA PROPAGACIÓN DE UNA ONDA A TRAVÉS DE UN SISTEMA DE MULTICAPAS

En este apéndice se presenta el programa elaborado en Fortran 90 paralelizado que simula la propagación de una onda Gaussiana a través de un sistema de multicapas, siendo el caso específico del sistema de Kretschmann para una película de plata. Se muestra el programa principal y las subrutinas para el IEM y el TMM; además, la subrutina para el modelo de Lorentz-Drude para la plata.

```
Module parametros !Este es el modulo de los parametros principales.
  Implicit none
  !Numero de interfaces
  Integer,parameter:: nin=2
  Integer,parameter:: nun=nin+1
  Integer,parameter:: non=nin-1
  Integer,parameter:: Gene=2*nin-1
  !Polarizacion 2-s,1-p
  Integer,parameter:: pol=1
  !Frente de onda 2-gauss, 1-plano
  Integer,parameter:: fdo=2
  !Punto de choque con la interface del haz
  Real*8,parameter:: pd=0.0d0
  !Paso de discretizacion de los angulos
  Real*8,parameter:: dthet=0.03125 !0.1250d0
  !Numero de angulos de incidencia
  Integer,parameter:: nang=2560
```

```

!Angulos de esparcimiento
Integer,parameter::ptet=360
!Longitud de onda minima minima
Real*8,parameter:: lambdmin=0.313d0
!Numero de puntos en el intervalo longitudes de onda
Integer,parameter:: lambdnum=100
!Paso de la longitud de onda
Real*8,parameter:: dlambd=1/dfloat(lambdnum)
Real*8,parameter:: pi=4*datan(1.0d0)
!Longitud de la superficie
Real*8,parameter:: lon=6*pi
Real*8,parameter:: wmax2=8
!Longitud del semiancho del haz gausiano
Real*8,parameter:: g=80*((0.633)/(2.0d0*pi))
Real*8,parameter:: lamdmin=2*pi/wmax2
Real*8,parameter:: ds=lamdmin/200
!Punto inicial de la interfaz
Real*8,parameter:: xi=-lon/2.0d0
!Punto final de la interfaz
Real*8,parameter:: xf=lon/2.0
!Numero de puntos para cada interfaz
Integer,parameter:: npt=dint(abs(xf-xi)/ds)
!Dimension de la matriz
Integer,parameter:: mnpt=npt*nin*2
Real*8,parameter:: rad=pi/180.0d0
Complex*16,parameter:: im=dcmplx(0.0d0,1.0d0)
Complex*16,parameter:: zero=dcmplx(0.0d0,0.0d0)
Complex*16,parameter:: uno=dcmplx(1.0d0,0.0d0)
Complex*16,parameter:: medio=dcmplx(0.5d0,0.0d0)
Real*8,parameter:: vc= 3.0*10.0**(14)
End Module parametros
! Inicio del programa principal.
Program MultDie
  Use parametros
  Implicit None
  Integer:: i,j,INFO,ipvt(mnpt),v,kk,ind
  Real*8:: d(nin),theta(nang),thetaes(nin,nang),theti,fj,dwnum,vw,nir,nirr
  Real*8:: x(3,npt*nin),y(3,npt*nin),fact(2,nang),Itr(nang),Itt(nang),k0
  Real*8:: refracT(nang),transmiT(nang),conserv(nang),aux,absor(nang),Re(nang)
  Complex*16:: ni(nun),M(mnpt,mnpt),k(nun),front(nin),ei(mnpt,nang),f(mnpt,nang)
  Real*8:: omega,omega_p,gamma2,epsrLD,epsilD,epsrD,epsid,wn,En(nang),Tr(nang)
  Complex*16:: eps(nun),mu(nun),LoDru
  real*8:: lambd,nu,refracTGene(nang),transmiTGene(nang),conservGene(nang),Ev
  real*8:: dlam,lam0
  External ZGESV
  ! Parametros para la paralelizacion
  include 'mpif.h'
  integer,parameter::MASTER = 0
  integer,parameter::sizearray=lambdnum
  integer:: numtasks, taskid, len, ierr,nproces,offset
  character(MPI_MAX_PROCESSOR_NAME):: hostname
  integer::partner,message, status(MPI_STATUS_SIZE)
  Integer::N,inicio,epp,extra,cols,chunksize,error

```

```

! Instrucciones para la paralelizacion
Real, Dimension(sizearray) :: lambd0,frecuency,salida1
Real, Dimension(sizearray*nang) :: reflect,trans,energ,salida2,salida3,salida4
real, dimension (:),allocatable :: lambd
call MPI_INIT(ierr)
call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, numtasks, ierr)
nproces=numtasks-1
call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, taskid, ierr)
call MPI_GET_PROCESSOR_NAME(hostname, len, ierr)
chunksize=sizearray/numtasks
ALLOCATE(lambd(chunksize),STAT=error)
! si size_array no es divisible por nproc abortamos la ejecucion
if (chunksize*numtasks .ne. sizearray) then
    call MPI_Abort(MPI_COMM_WORLD,ierr)
    stop
end if
!Archivos metodo numerico
Open(37,file='Reflectancia.dat')
Open(38,file='Transmitancia.dat')
Open(39,file='Conservacion.dat')
!Archivos Analitico
Open(17,file='ReGene.dat')
Open(18,file='TrGene.dat')
Open(19,file='ConGene.dat')
! inicializacion del arreglo
if(taskid==MASTER)then
    do i=1,lambdnum
        lambd0(i)=lambdmin+dlambd*float(i-1)
        Ev =4.13566733e-1*2.99792458/lambd0(i)
        !Permitividad electrica
        eps(1)=2.968729*uno
        eps(2)=LoDru(Ev)
        eps(3)=uno
        !Permeabilidad magnetica
        mu(1)=1.0d0
        mu(2)=1.0d0
        mu(3)=1.0d0
        k0=2*pi/lambd0(i)
        !Indices de refraccion
        Do j=1,nun
            ni(j)=sqrt(mu(j)*eps(j))
        End do
        !Magnitud Vector de Onda
        Do j=1,nun
            k(j)=ni(j)*2.0d0*pi/lambd0(i)
        End do
        !angulo inicial
        theti=0.0d0
        theta=0.0d0
        Do j=1,nang
            fj=float(j)
            theta(j)=theti+float(j-1)*dthet
            theta(j)=rad*theta(j)
        End do
    end do
end if

```

```

        End do
        d(1)=0.0
        d(2)=0.04
        Call AnalitGene(theta,ni,refractGene, &
            transmitGene,conservGene,d,k0,lambd0(i))
    end do
endif
! Distribuimos la tarea a cada nucleo esclavo
call MPI_SCATTER(lambd0,chunksize,MPI_REAL,lambd, chunksize, &
MPI_REAL, 0,MPI_COMM_WORLD, ierr)
! se colecta el resultado de los esclavos
! Distribuimos el trabajo a cada esclavo
Do id=1,chunksize
    Call Interfaz(npt,nin,x,y,d)
    d(1)=0.0
    d(2)=0.04
    Ev =4.13566733e-1*2.99792458/lambd(id)
    !Permitividad electrica
    eps(1)=2.968729*uno
    eps(2)=LoDru(Ev)
    eps(3)=uno
    !Permeabilidad magnetica
    mu(1)=1.0d0
    mu(2)=1.0d0
    mu(3)=1.0d0
    !Indices de refraccion
    Do j=1,nun
        ni(j)=sqrt(mu(j)*eps(j))
    End do
    !Magnitud vector de onda
    Do j=1,nun
        k(j)=ni(j)*2*pi/lambd(id)
    End do
    !Condiciones de frontera
    If(pol.eq.1)Then
        Do j=1,nin
            front(j)= (ni(j)/ni(j+1))**2
        End do
    Else
        Do j=1,nin
            front(j)=uno
        End do
    End if
    !vector de angulos
    theti=0.0d0
    theta=0.0d0
    Do j=1,nang
        fj=float(j)
        theta(j)=theti+float(j-1)*dthet
        theta(j)=rad*theta(j)
    End do
    !Calculo de la matriz
    Call Matm(M,k,front,x,y)

```

```

!Onda incidnete
Call einumnr(ei,x,y,theta,k(1),k(1))
Call ZGESV(mnpt,nang,M,mnpt,ipvt,ei,mnpt,INFO)
f=ei
!Factor de normalizacion
Call FacNor(ni,theta,fact,k,wn)
!Calculo de la Reflctancia
Call R_T_campo_lejano('R',k(1),x,y,fact,f,Itr,front(1),1)
!Calculo de la transmitancia
Call R_T_campo_lejano('T',k(nun),x,y,fact,f,Itt,front(nin),2)
Do i=1,nang*id
    trans(nang*(id-1)+i)=Itt(i)
    reflect(nang*(id-1)+i)=Itr(i)
    energ(nang*(id-1)+i)=Itt(i)+Itr(i)
End do
End do
call MPI_GATHER(lambd,chunksize,MPI_REAL, &
salida1,chunksize,MPI_REAL,0,MPI_COMM_WORLD,ierr)
call MPI_GATHER(reflect,chunksize*nang,MPI_REAL, &
salida2,chunksize*nang,MPI_REAL,0,MPI_COMM_WORLD,ierr)
call MPI_GATHER(trans,chunksize*nang,MPI_REAL, &
salida3,chunksize*nang,MPI_REAL,0,MPI_COMM_WORLD,ierr)
call MPI_GATHER(energ,chunksize*nang,MPI_REAL, &
salida4,chunksize*nang,MPI_REAL,0,MPI_COMM_WORLD,ierr)
if(taskid==MASTER)then
    do i=1,sizearray
        do j=1, nang
            write(39,*)salida1(i),j,salida2(nang*(i-1)+j)
            write(38,*)salida1(i),j,salida3(nang*(i-1)+j)
            write(37,*)Salida1(i),j,salida4(nang*(i-1)+j)
        end do
    end do
end if
Close(17)
Close(18)
Close(19)
Close(37)
Close(38)
Close(39)
call MPI_FINALIZE(ierr)
End
Subroutine FacNor(ni,theta,fact,k,nw)
Use parametros
Implicit none
Integer:: v
Complex*16::ni(nun),k(nun)
Real*8::theta(nang),fact(2,nang),nw,wgc,wgc2
Do v=1,nang
    If(fdo.eq.1)then
        fact(1,v)=8.0d0*pi*k(1)*cos(theta(v))*lon
        if(pol.eq.2) then
            fact(2,v)=8.0d0*pi*k(nun)*(ni(1)/ni(nun))*cos(theta(v))*lon
        else

```

```

        fact(2,v)=8.0d0*pi*k(nun)*(ni(nun)/ni(1))*cos(theta(v))*lon
    end if
Else
    fact(1,v)=2.0*((2.0*pi)**1.5)*g*k(1)*cos(theta(v))
    if(pol.eq.2) then
        fact(2,v)=2.0*((2.0*pi)**1.5)*g*k(nun)*(ni(1)/ni(nun))*cos(theta(v))
    else
        fact(2,v)=2.0*((2.0*pi)**1.5)*g*k(nun)*(ni(nun)/ni(1))*cos(theta(v))
    end if
End if
End do
Return
End subroutine
Subroutine Interfaz(npts,nins,x,y,d)
    Use parametros
    Implicit none
    Integer::o,iter,j,i,npts,nins
    Real*8::x(3,npts*nins),y(3,npts*nins),d(nins),dist(nins)
    dist(1)=-d(1)
    If (nins.ge.2)then
        Do o=2,nins
            dist(o)=dist(o-1)-d(o)
        End do
    End if
    Open(10,file='Interfaz.dat')
    Do i=1,nins
        Do j=1,npts
            iter=(i-1)*npts
            If (mod(i-1,2).eq.0)Then
                x(1,iter+j)=xi+(xf-xi)*(j-1)/(npts-1)
                y(1,iter+j)=dist(i)
                x(2,iter+j)=1.0d0
                y(2,iter+j)=0.0d0
                x(3,iter+j)=0.0d0
                y(3,iter+j)=0.0d0
                Write(10,*) x(1,iter+j),y(1,iter+j)
            Else
                x(1,iter+j)=xf-(xf-xi)*(j-1)/(npts-1)
                y(1,iter+j)=dist(i)
                x(2,iter+j)=-1.0d0
                y(2,iter+j)=0.0d0
                x(3,iter+j)=0.0d0
                y(3,iter+j)=0.0d0
                Write(10,*) x(1,iter+j),y(1,iter+j)
            End if
        End do
    End do
    Close(10)
    Return
End Subroutine
!Matriz del IEM
Subroutine Matm(M,k,front,x,y)
    Use parametros

```

```

implicit none
Complex*16:: M(npt*2*nin,npt*2*nin),Lmn,Nmn,k(nun),front(nin),dmn
Real*8::x(3,npt*nin),y(3,nin*npt)
Real*8 :: Valor
Integer:: i,j,v,o
Integer:: count1,count2,count3,count4,count5
M = zero
Do i=1,nin*2
  count1=1
  If(mod(i,2).eq.0)Then
    count2=i-2
    count3=count2
    count4=i/2
    count5=count4+((i+2)/2)
  Else
    count2=i-3
    count3=count2
    count4=(i-1)/2
    count5=count4+((i+1)/2)
  End if
  Do v=1,nin*2
    If((i.eq.1).or.(i.eq.(nin*2)))Then
      Do o=1,npt
        Do j=1, npt
          If(((i.eq.1).and.(v.le.2)).or.((i.eq.(nin*2)).and.(v.ge.(nin*2-1))))Then
            If(mod(v,2).ne.0)Then
              IF(i.eq.1)Then
                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=-front(i)*Lmn(k(1),x,y,o,j)
              Else
                If(mod(count4,2).ne.0)Then
                  M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=Lmn(k(nun),x,y,&
                    o+(npt*(nin-1)),j+(npt*(nin-1)))
                Else
                  M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=-Lmn(k(nun),x,y,&
                    o+(npt*(nin-1)),j+(npt*(nin-1)))
                End if
              End if
            End if
          Else
            IF(i.eq.1)Then
              M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=Nmn(k(1),x,y,o,j) - dmn(o,j)
            Else
              IF(mod(count4,2).ne.0)Then
                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=-Nmn(k(nun),x,y,&
                  o+(npt*(nin-1)),j+(npt*(nin-1)))
              ELse
                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                  Nmn(k(nun),x,y,o+(npt*(nin-1)),j+(npt*(nin-1)))-&
                  dmn(o,j)
              End if
            End if
          End if
        End if
      End if
    Else
      M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=zero
    End if
  End if
End if

```

```

        End if
    End do
End do
Else
    Do o=1,npt
        Do j=1,npt
            If(count2.ge.1)Then
                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=zero
            Else
                If(mod(count4,2).ne.0)Then
                    IF(count1.le.(4+count3))Then
                        If(mod(i,2).eq.0)Then
                            If(v.lt.count5)Then
                                If(mod(v,2).ne.0)Then
                                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=Lmn(k(count4+1),x,y,&
                                        npt*(count4-1)+o,npt*(count4-1)+j)
                                Else
                                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=-Nmn(k(count4+1),x,y,&
                                        npt*(count4-1)+o,npt*(count4-1)+j)
                                End if
                            Else
                                If(mod(v,2).ne.0)Then
                                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=front(count4+1)*&
                                        Lmn(k(count4+1),x,y,&
                                        npt*(count4-1)+o,npt*count4+j)
                                Else
                                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                                        -Nmn(k(count4+1),x,y,&
                                        npt*(count4-1)+o,npt*count4+j)
                                End if
                            End if
                        End if
                    Else
                        If(v.lt.count5)Then
                            If(mod(v,2).ne.0)Then
                                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                                    Lmn(k(count4+1),x,y,&
                                    npt*count4+o,npt*(count4-1)+j)
                            Else
                                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                                    -Nmn(k(count4+1),x,y,&
                                    npt*count4+o,npt*(count4-1)+j)
                            End if
                        Else
                            If(mod(v,2).ne.0)Then
                                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                                    front(count4+1)* &
                                    Lmn(k(count4+1),x,y,&
                                    npt*count4+o,npt*count4+j)
                            Else
                                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                                    -Nmn(k(count4+1),x,y,&
                                    npt*count4+o,npt*count4+j)
                            End if
                        End if
                    End if
                End if
            End if
        End do
    End do

```

```

        End if
    End if
Else
    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=zero
End if
Else
    IF(count1.le.(4+count3))Then
        If(mod(i,2).eq.0)Then
            If(v.lt.count5)Then
                If(mod(v,2).ne.0)Then
                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                    -Lmn(k(count4+1),x,y,&
                    npt*(count4-1)+o,npt*(count4-1)+j)
                Else
                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=Nmn(k(count4+1),x,y,&
                    npt*(count4-1)+o,npt*(count4-1)+j)-&
                    dmn(npt*(count4-1)+o,npt*(count4-1)+j)
                End if
            Else
                If(mod(v,2).ne.0)Then
                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=-front(count4+1)* &
                    Lmn(k(count4+1),x,y,&
                    npt*(count4-1)+o,npt*count4+j)
                Else
                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                    Nmn(k(count4+1),x,y,&
                    npt*(count4-1)+o,npt*count4+j)-&
                    dmn(npt*(count4-1)+o,npt*count4+j)
                End if
            End If
        Else
            If(v.lt.count5)Then
                If(mod(v,2).ne.0)Then
                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                    -Lmn(k(count4+1),x,y,&
                    npt*count4+o,npt*(count4-1)+j)
                Else
                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                    Nmn(k(count4+1),x,y,&
                    npt*count4+o,npt*(count4-1)+j) &
                    -dmn(npt*count4+o,npt*(count4-1)+j)
                End if
            Else
                If(mod(v,2).ne.0)Then
                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                    -front(count4+1)* &
                    Lmn(k(count4+1),x,y,&
                    npt*count4+o,npt*count4+j)
                Else
                    M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)= &
                    Nmn(k(count4+1),x,y,&
                    npt*count4+o,npt*count4+j) &
                    -dmn(npt*count4+o,npt*count4+j)
                End if
            End if
        End if
    End if
End if

```

```

                                End if
                                End If
                                End if
                                Else
                                M(npt*(i-1)+o,npt*(v-1)+j)=zero
                                End if
                                End If
                                End if
                                End do
                                End do
                                count1=count1+1
                                count2=count2-1
                                End if
                                End do
                                End do
                                Open(9,file='Matriz.dat')
                                Do i=1,npt*2*nin
                                Do j=1,npt*2*nin
                                Valor=M(i,j)
                                Write(9,*) i,j,Valor
                                End do
                                End do
                                close(9)
                                return
end subroutine
Subroutine einumnr(ei,x,y,theta,nw,kl)
Use parametros
Implicit none
Integer:: i,j,v,nq
Real*8:: fj,gc,arg
Real*8:: x(3,npt*nin),y(3,npt*nin),theta(nang),Aqkp,Aqkm,fac,kp
Real*8:: alpha0,q,dq,x1,x3
Complex*16:: ei(mnpt,nang),sum,nw,kl
gc=g*g
nq=721
dq=2.0*nw/(float(nq)-1.0)
Do v=1,nang
kp=nw*sin(theta(v))
Do i=1,mnpt
If(i.le.npt)then
x1=x(1,i)
x3=y(1,i)-pd
sum=zero
Do j=1,nq-2
fj=float(j)
q=-nw+fj*dq
alpha0=sqrt(nw*nw-q*q)
Aqkp=sqrt(pi)*g*exp(-(g*(q-kp)/2.0)**2)
arg=q*x1-alpha0*x3
sum=sum+Aqkp*exp(im*arg)
End do
If(fdo.eq.2)then
ei(i,v)=sum*dq/(2.0*pi)

```

```

                Else
                    ei(i,v)=exp(im*kl*(x(1,i)*sin(theta(v))-y(1,i)*cos(theta(v))))
                End if
            Else
                ei(i,v)=zero
            End if
        End do
    End do
    Return
End Subroutine
!Calculo de la reflectancia y transmitancia
Subroutine R_T_campo_lejano(RT,kl,x,y,fact,fun,It,f01,o)
    Use parametros
    Character::RT*1
    Integer::i,j,tmax,tetmin,tetmax,v,o
    Real*8::x(3,npt*nin),y(3,npt*nin),Pty(0:ptet),tetg,tets
    Real*8::fact(2,nang),It(nang),Imax
    Complex*16::z, E_H,fun(mnpt,nang),f01,kl
    It=0
    Pty=0
    If(RT.eq.'R') then
        tetmin=0;tetmax=180
    Else
        tetmin=180;tetmax=360
    End if
    Open(10,file=RT)
    Do v=1, nang
        It(v)=0.0d0
        Imax=0.0d0
        Do i=tetmin,tetmax !Angulo de esparcimiento
            tetg=dfloat(i)-90.0d0 !-90 a 269 grados
            tets=tetg*pi/180.0d0 !-pi/2 a casi 3pi/2 rads
            E_H=zero
            Do j=1,npt
                If(RT.eq.'R') then
                    z=im*kl*(dsin(tets)*y(2,j)-dcos(tets)*x(2,j))
                    E_H=E_H+ds*(-(f01*fun(j,v))+z*fun(j+npt,v))* &
                        exp((-kl*im)*(x(1,j)*dsin(tets) + y(1,j)*dcos(tets)))
                Else
                    z=im*kl*(dsin(tets)*y(2,j+(npt*(nin-1)))- &
                        dcos(tets)*x(2,j+(npt*(nin-1))))
                    E_H=E_H+ds*(-(fun(j+npt*(2*nin-2),v))+z*fun(j+npt*(2*nin-1),v))* &
                        exp((-kl*im)*(x(1,j+npt*(nin-1))*dsin(tets) - &
                            y(1,j+npt*(nin-1))*dcos(tets)))
                End if
            End do
            Pty(i)=(pi/180.0d0)*dreal(E_H*dconjg(E_H))/fact(o,v)
            If(Pty(i).gt.Imax) then
                tmax=tetg
                Imax=Pty(i)
            End if
            It(v)=It(v)+Pty(i)
        Write(10,*) tetg+90.0d0,Pty(i)
    End do
End Subroutine

```

```

        End do
    End do
    Close(10)
    If(tmax.gt.90) then; tmax=180.0d0-tmax;endif
end subroutine
!Metodo Analitico solo para dielectricos
Subroutine Analit(theta,thetaes,ni,refracT,transmiT,conserv,k,d)
    Use parametros
    Implicit none
    Integer::i,j,v,count
    Real*8::theta(nang),thetaes(nin,nang),refracT(nang)
    Real*8::transmiT(nang),d(nin),conserv(nang)
    Complex*16::ni(nun),ref(nin,nang),tra(nin,nang),divn(nin,nang),divc(nin,nang)
    Complex*16::refrac(nin,nang),transmi(nin,nang),k(nun)
    !Calculo de la solucion analitica:
    do v=1,nin
        do i=1,nang
            refrac(v,nang)=zero
            transmi(v,nang)=zero
        end do
    end do
    Do j=1,nin
        Do i=1,nang
            If (j.eq.1)Then
                divn(j,i)=ni(j)*cos(theta(i))+ni(j+1)*cos(thetaes(j,i))
                divc(j,i)=ni(j+1)*cos(theta(i))+ni(j)*cos(thetaes(j,i))
            Else
                divn(j,i)=ni(j)*cos(thetaes(j-1,i))+ni(j+1)*cos(thetaes(j,i))
                divc(j,i)=ni(j+1)*cos(thetaes(j-1,i))+ni(j)*cos(thetaes(j,i))
            End if
        End do
    End do
    If(pol.eq.2)then
        Do i=1,nin
            Do v=1,nang
                If(i.eq.1)Then
                    ref(i,v)=(ni(i)*cos(theta(v))-ni(i+1)*cos(thetaes(i,v)))/divn(i,v)
                    tra(i,v)=2*ni(i)*cos(theta(v))/divn(i,v)
                Else
                    ref(i,v)=(ni(i)*cos(thetaes(i-1,v))-ni(i+1)* &
                    cos(thetaes(i,v)))/divn(i,v)
                    tra(i,v)=2*ni(i)*cos(thetaes(i-1,v))/divn(i,v)
                End If
            End do
        End do
    Else
        Do i=1,nin
            Do v=1,nang
                If(i.eq.1)Then
                    ref(i,v)=(ni(i+1)*cos(theta(v))-ni(i)*cos(thetaes(i,v)))/divc(i,v)
                    tra(i,v)=2*ni(i)*cos(theta(v))/divc(i,v)
                Else
                    ref(i,v)=(ni(i+1)*cos(thetaes(i-1,v))-ni(i)* &

```

```

        cos(thetaes(i,v))/divc(i,v)
        tra(i,v)=2*ni(i)*cos(thetaes(i-1,v))/divc(i,v)
    End If
End do
End do
End if
If(nin.eq.1)then
    Do j=1,nang
        refrac(1,j)=ref(1,j)
        transmi(1,j)=tra(1,j)
    End do
Else
    Do v=2,nin
        Do j=1,nang
            if(v.eq.2)Then
                refrac(v,j)=(ref(v,j)+ref(v-1,j)* &
                    exp(im*2*k(v)*d(v)*cos(thetaes(v-1,j))))/ &
                    (1+ref(v-1,j)*ref(v,j)*exp(im*2*k(v)*d(v)*cos(thetaes(v-1,j))))
                transmi(v,j)=(tra(v,j)*tra(v-1,j)* &
                    exp(im*k(v)*d(v)*cos(thetaes(v-1,j))))/ &
                    (1+ref(v-1,j)*ref(v,j)*exp(im*2*k(v)*d(v)*cos(thetaes(v-1,j))))
            Else
                refrac(v,j)=(ref(v,j)+refrac(v-1,j)* &
                    exp(im*2*k(v)*d(v)*cos(thetaes(v-1,j))))/ &
                    (1+refrac(v-1,j)*ref(v,j)*exp(im*2*k(v)*d(v)*cos(thetaes(v-1,j))))
                transmi(v,j)=(tra(v,j)*transmi(v-1,j)* &
                    exp(im*k(v)*d(v)*cos(thetaes(v-1,j))))/ &
                    (1+refrac(v-1,j)*ref(v,j)*exp(im*2*k(v)*d(v)*cos(thetaes(v-1,j))))
            End if
        End do
    End do
End If
Open(27,file='R.dat')
Open(28,file='T.dat')
Open(29,file='R+T.dat')
Do i=1, nang
    refracT(i)=real(refrac(nin,i)*conjg(refrac(nin,i)))
    transmiT(i)=((ni(nun)*cos(thetaes(nin,i)))/ &
        (ni(1)*cos(theta(i))))*real(transmi(nin,i)*conjg(transmi(nin,i)))
    conserv(i)=refracT(i)+transmiT(i)
    Write(27,*) theta(i)/rad,refracT(i)
    Write(28,*) theta(i)/rad,transmiT(i)
    Write(29,*) theta(i)/rad,conserv(i)
End do
Close(27)
Close(28)
Close(29)
Return
end subroutine
!Metodo de la Matriz de Transferencia
Subroutine AnalitGene(theta,ni,refracTGene,transmiTGene,conservGene,d,k0,lam)
    Use parametros
    Implicit none

```

```

Integer::i,j,v,h,contP,contT,l,k
Real*8::theta(nang),refracTGene(nang),transmitGene(nang),d(nin)
Real*8::Kz(nang),k0,lam,conservGene(nang)
Complex*16::ni(nun),Kx(nun,nang),rij(nin,nang),tij(nin,nang)
Complex*16::coseno(non,nang),phi(non,nang),P(non,nang,2,2)
Complex*16::T(nin,nang,2,2),r(nang),tr(nang),MaGene(nang,2,2),Muleta(2,2)
contP=1
contT=1
Do i=1, nang
    MaGene(i,1,1)=1.0d0
    MaGene(i,1,2)=0.0d0
    MaGene(i,2,1)=0.0d0
    MaGene(i,2,2)=1.0d0
End do
Do i=1,nang
    Kz(i)=ni(1)*k0*sin(theta(i))
End do
Do j=1, nun
    Do i=1, nang
        Kx(j,i)=sqrt((ni(j)*k0)**2-Kz(i)**2)
    End do
End do
Do h=1,nin
    Do i=1, nang
        !Coeficientes de Fresnel
        If(pol.eq.2)Then
            rij(h,i)=(Kx(h,i)-Kx(h+1,i))/(Kx(h,i)+Kx(h+1,i))
            tij(h,i)=1+rij(h,i)
        Else
            rij(h,i)=(ni(h)**2*Kx(h+1,i)-ni(h+1)**2*Kx(h,i))/ &
                (ni(h)**2*Kx(h+1,i)+ni(h+1)**2*Kx(h,i))
            tij(h,i)=((ni(h)/ni(h+1)))*(1+rij(h,i))
        End if
    End do
End do
!Matriz de transmision
Do h=1,nin
    Do i=1,nang
        T(h,i,1,1)=1/(tij(h,i))
        T(h,i,1,2)=rij(h,i)/tij(h,i)
        T(h,i,2,1)=rij(h,i)/tij(h,i)
        T(h,i,2,2)=1/(tij(h,i))
    End do
End do
If(nin.eq.1)Then
    Do i=1, nang
        Muleta(1,1)=MaGene(i,1,1)
        Muleta(1,2)=MaGene(i,1,2)
        Muleta(2,1)=MaGene(i,2,1)
        Muleta(2,2)=MaGene(i,2,2)
        MaGene(i,1,1)=Muleta(1,1)*T(contT,i,1,1)+Muleta(1,2)*T(contT,i,2,1)
        MaGene(i,1,2)=Muleta(1,1)*T(contT,i,1,2)+Muleta(1,2)*T(contT,i,2,2)
        MaGene(i,2,1)=Muleta(2,1)*T(contT,i,1,1)+Muleta(2,2)*T(contT,i,2,1)
    End do
End if

```

```

        MaGene(i,2,2)=Muleta(2,1)*T(contT,i,1,2)+Muleta(2,2)*T(contT,i,2,2)
    End do
Else
    Do v=1, non
        Do i=1, nang
            coseno(v,i)=sqrt(1-((ni(1)/ni(v+1))*sin(theta(i)))**2)
        End do
    End do
    Do v=1, non
        Do i=1, nang
            phi(v,i)=k0*d(v+1)*ni(v+1)*coseno(v,i)
        End do
    End do
    !Matriz de Propagacion
    Do v=1,non
        Do i=1,nang
            P(v,i,1,1)=exp(-1*im*phi(v,i))
            P(v,i,1,2)=zero
            P(v,i,2,1)=zero
            P(v,i,2,2)=exp(im*phi(v,i))
        End do
    End do
    Do l=1, Gene
        IF(mod(l,2).ne.0)Then
            Do i=1, nang
                Muleta(1,1)=MaGene(i,1,1)
                Muleta(1,2)=MaGene(i,1,2)
                Muleta(2,1)=MaGene(i,2,1)
                Muleta(2,2)=MaGene(i,2,2)
                MaGene(i,1,1)=Muleta(1,1)*T(contT,i,1,1)+Muleta(1,2)*T(contT,i,2,1)
                MaGene(i,1,2)=Muleta(1,1)*T(contT,i,1,2)+Muleta(1,2)*T(contT,i,2,2)
                MaGene(i,2,1)=Muleta(2,1)*T(contT,i,1,1)+Muleta(2,2)*T(contT,i,2,1)
                MaGene(i,2,2)=Muleta(2,1)*T(contT,i,1,2)+Muleta(2,2)*T(contT,i,2,2)
            End do
            contT=contT+1
        Else
            Do i=1, nang
                Muleta(1,1)=MaGene(i,1,1)
                Muleta(1,2)=MaGene(i,1,2)
                Muleta(2,1)=MaGene(i,2,1)
                Muleta(2,2)=MaGene(i,2,2)
                MaGene(i,1,1)=Muleta(1,1)*P(contP,i,1,1)+Muleta(1,2)*P(contP,i,2,1)
                MaGene(i,1,2)=Muleta(1,1)*P(contP,i,1,2)+Muleta(1,2)*P(contP,i,2,2)
                MaGene(i,2,1)=Muleta(2,1)*P(contP,i,1,1)+Muleta(2,2)*P(contP,i,2,1)
                MaGene(i,2,2)=Muleta(2,1)*P(contP,i,1,2)+Muleta(2,2)*P(contP,i,2,2)
            End do
            contP=contP+1
        End if
    End do
End if
Do i=1, nang
    r(i)=MaGene(i,2,1)/MaGene(i,1,1)
    tr(i)=1/MaGene(i,1,1)

```

```

End Do
Do i=1, nang
  if(pol.eq.2)Then
    transmitGene(i)=((ni(nun)*sqrt(1-(ni(1)/ni(nun)*sin(theta(i)))**2))/ &
      (ni(1)*cos(theta(i))))*real(tr(i)*conjg(tr(i)))
  Else
    transmitGene(i)=((ni(nun)/ni(1))**3)*((cos(theta(i)))/ &
      (sqrt(1-(ni(1)/ni(nun)*sin(theta(i)))**2)))*real(tr(i)*conjg(tr(i)))
  End if
  refractGene(i)=real(r(i)*conjg(r(i)))
  conservGene(i)=refractGene(i)+transmitGene(i)
  Write(17,*)lam,theta(i)/rad, refractGene(i)
  Write(18,*)lam,theta(i)/rad, transmitGene(i)
  Write(19,*)lam,theta(i)/rad, conservGene(i)
End do
Return
end subroutine
complex*16 function Lmn(kl,x,y,mm,nn)
  use parametros
  implicit none
  integer::mm,nn,nzz,ierr
  real*8::x(3,npt*nin),y(3,npt*nin),dpq
  complex*16::kl,dmn
  complex::z,cy(1)
  dpq=dsqrt((x(1,mm)-x(1,nn))*(x(1,mm)-x(1,nn)) &
    +(y(1,mm)-y(1,nn))*(y(1,mm)-y(1,nn)))
  if (dpq.gt.(0.25d0*ds))then
    z=kl*dpq
  else
    z=kl*ds/(2.0d0*dexp(1.0d0))
  end if
  call cbesh(z,0.,1,1,1,cy,nzz,ierr)
  call errchk(z,ierr)
  Lmn=(0.25d0*im*ds)*(cy(1))
end function Lmn
complex*16 function Nmn(kl,x,y,mm,nn)
  use parametros
  implicit none
  integer::mm,nn,nzz,ierr
  real*8::x(3,npt*nin),y(3,npt*nin),dpq
  complex*16::kl,dmn
  complex::z,cy(1)
  dpq=dsqrt((x(1,mm)-x(1,nn))*(x(1,mm)-x(1,nn)) &
    +(y(1,mm)-y(1,nn))*(y(1,mm)-y(1,nn)))
  z=kl*dpq
  if (dpq.gt.(0.25d0*ds)) then
    call cbesh(z,1.,1,1,1,cy,nzz,ierr)
    call errchk(z,ierr)
    Nmn=(0.25d0*im*ds)*(-y(2,nn)*(x(1,mm)-x(1,nn))+x(2,nn)* &
      (y(1,mm)-y(1,nn)))*kl*(cy(1))/dpq
  else
    Nmn=0.5d0+(0.25d0*ds/pi)*(y(3,nn)*x(2,nn)-x(3,nn)*y(2,nn))
  end if

```

```

end function Nmn
Complex*16 Function dmn(m,n)
  Integer:: m,n
  If(m.ne.n) then
    dmn=dcmplx(0.0d0,0.0d0)
  Else
    dmn=dcmplx(1.0d0,0.0d0)
  End if
End function dmn
! Modelo de Lorentz-Drude aplicado a plata
Complex*16 Function LoDru(Ev)
  Use parametros
  Implicit none
  Real*8::f0,f1,f2,f3,f4,f5,ga0,ga1,ga2,ga3,ga4,ga5
  Real*8::w1,w2,w3,w4,w5,wp,omp,Ev
  wp = 9.01
  f0 = 0.845
  ga0 = 0.048
  f1 = 0.065
  ga1 = 3.886
  w1 = 0.816
  f2 = 0.124
  ga2 = 0.452
  w2 = 4.481
  f3 = 0.011
  ga3 = 0.065
  w3 = 8.185
  f4 = 0.840
  ga4 = 0.916
  w4 = 9.083
  f5 = 5.646
  ga5 = 2.419
  w5 = 20.29
  omp = f0**.5*wp
  LoDru = 1-omp**2/(Ev*(Ev+ga0*im))
  LoDru = LoDru + (f1*wp**2/((w1**2-Ev**2)-im*Ev*ga1))
  LoDru = LoDru + (f2*wp**2/((w2**2-Ev**2)-im*Ev*ga2))
  LoDru = LoDru + (f3*wp**2/((w3**2-Ev**2)-im*Ev*ga3))
  LoDru = LoDru + (f4*wp**2/((w4**2-Ev**2)-im*Ev*ga4))
  LoDru = LoDru + (f5*wp**2/((w5**2-Ev**2)-im*Ev*ga5))
  Return
End Function

```

Referencias

- Almog, I. F., Bradley, M. S., and Bulovic, V. (2011). The lorentz oscillator and its applications. *Massachusetts Intitute of Technology*.
- Behrisch, R. (1981). *Sputtering by Particle Bombardment I*, Vol. 47. Springer-Verlag, Berlin.
- Benavides, M., Calderón, C., Gomez, J., Rodríguez, M., Cruz, I., Laguna, J. R., Morales, L. J., Enciso, M., Pérez, H., Escalante, J. E., López, J. E., and Juárez, G. (2016). Numerical simulation of metallic nanostructures interacting with electromagnetic fields using the Lorentz-Drude model and FDTD method. *Int. J. Mod. Phys.*, **27**(4).
- Bera, M. and Ray, M. (2009). Precise detection and signature of biological/chemical samples based on surface plasmon resonance (spr). *Journal of Optics*, **38**(4): 232–248.
- Brown, T. J., LeMay, H. E., Bursten, B. E., and R., B. J. (2004). *Química, La ciencia central*. Pearson Educación, novena edición.
- Centeno Jiménez, T. P. (2014). *Estructuras de bandas de cristales fotónicos en 2D con superficies rugosas usando un método integral*. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas. Págs. 31-44.
- Dobkin, D. and Zuraw, M. K. (2003). *Principles of Chemical Vapor Deposition*. Springer Netherlands. first edition.
- Drude, P. (1900). Zur Elektronentheorie der metalle. *Ann. Phys.*, **306**(3): 566–613.
- Fano, U. (1956). Atomic Theory of Electromagnetic Interactions in Dense Materials. *Phys. Rev.*.
- Gibson, W. C. (2007). *The Method of Moments in Electromagnetics*. Chapman y Hall/CRC, New York. first edition.
- Kretschmann, E. and Reather, H. (1968). Radiative Decay of Non-Radiative Surface Plasmon Excited by Light. *Z. Naturf.*
- Maradudin, A. A., Zayats, A., and I., S. (2005). Nano-optics of surface plasmon polaritons. *Phys. Reports*, **408**(3): 131–314.
- Mendoza, A., Villa, F., and Gaspar, A. (2006). Numerical method based on the solution of integral equations for the calculation of the band structure and reflectance of one- and two- dimensional photonic crystals. *J. Opt. Soc. Am. B*, **23**: 2249–2256.

- Mie, G. (1908). Beiträge Zur Optik Trüber Medien, Speziell Kolloidaler Metall Ösungen. *Ann. Phys.*, páginas 203–377.
- Otto, A. (1968). Excitation of Nonradiative Surface Plasma Waves in Silver by Method of Frustrated Total Reflection. *Z. Phys.*, **398**.
- Pines, D. (1956). Collective Energy Losses in Solids. *Rev. Mod. Phys.*, **28**: 184–198.
- Puente Díaz, L. E. (2017). *Respuesta Óptica de Cristales Fotónicos en 2D con Superficies Rugosas que Contienen Metamaterial Dispersivo*. Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas. Págs. 43-76.
- Pérez, E. (2015). *Estudio numérico de la propagación de la luz en guías de ondas periódicas y onduladas usando programación en paralelo*. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas. Págs. 23-47.
- Pérez, H. I., Valencia, C. I., Méndez, E. R., and Sánchez-Gil, J. A. (2009). On the transmission of diffuse light through thick slits. *J. Opt. Soc. Am. A*, **26**(4): 909–918.
- Ramírez, N. (2005). Biosensores: Un acercamiento a la resonancia del plasmon superficial. *Revista CENIC*, **36**.
- Ritchie, R. H. (1957). Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films. *Phys. Rev.*, **106**: 874–881.
- Vidal, F. J. and Moreno, L. M. (2008). Plasmones superficiales. *Investigación y Ciencia*, **67**.
- Yeh, P. (2005). *Optical Waves in Layered Media*. Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley.