

**Centro de Investigación Científica y de Educación
Superior de Ensenada, Baja California**



**Doctorado en Ciencias
en Óptica**

**Análisis multipolar del esparcimiento
electromagnético por partículas dieléctricas de alto
índice de refracción**

Tesis

para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de
Doctor en Ciencias

Presenta:

Miguel Ángel González Mandujano

Ensenada, Baja California, México

2019

Tesis defendida por

Miguel Ángel González Mandujano

y aprobada por el siguiente Comité

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez
Director de tesis

Dr. Pedro Negrete Regagnon

Dr. Francisco Villa Villa

Dr. Demetrio Macias Guzmán

Dr. José Antonio Sánchez Gil



Dr. Israel Rocha Mendoza
Coordinador del Posgrado en Óptica

Dra. Rufina Hernández Martínez
Directora de Estudios de Posgrado

Miguel Ángel González Mandujano © 2019

Queda prohibida la reproducción parcial o total de esta obra sin el permiso formal y explícito del autor y director de la tesis

Resumen de la tesis que presenta Miguel Ángel González Mandujano como requisito parcial para la obtención del grado de Doctor en Ciencias en Óptica.

Análisis multipolar del esparcimiento electromagnético por partículas dieléctricas de alto índice de refracción

Resumen aprobado por:

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez

Director de tesis

En esta tesis, se presenta un estudio de problemas de esparcimiento de luz por partículas dieléctricas de alto índice de refracción. De particular interés ha sido la excitación del momento dipolar magnético en las partículas, su interacción con otros multipolos y los detalles de su dependencia con la forma de la partícula. Para abordar estos problemas fue necesario el desarrollo de algunas herramientas teóricas y computacionales. En particular, fue esencial para el trabajo el desarrollo de técnicas numéricas basadas en ecuaciones integrales de superficie, tanto para el caso 2D como el 3D. Para validar los cálculos numéricos de esparcimiento en tres dimensiones, presentamos comparaciones con el software del dominio público SCUFF-EM, que es muy eficiente. También, con el propósito de analizar y describir a más detalle el esparcimiento electromagnético se desarrolló un método que nos permitió analizar el campo esparcido en términos de sus contribuciones multipolares. Utilizando estas herramientas presentamos cálculos de esparcimiento con partículas de formas distintas a la esfera y el cilindro infinito. En particular, son empleadas en tres aplicaciones de partículas dieléctricas de alto índice de refracción como lo son, en el diseño de espejos magnéticos, en el análisis del papel que juega la excitación de diferentes multipolos en la generación de segundo armónico y en el estudio de las resonancias de Fano en cilindros finitos.

Palabras clave: Esparcimiento, Método de momentos, Descomposición multipolar, Dieléctricos de alto índice de refracción, Resonancias magnéticas

Abstract of the thesis presented by Miguel Ángel González Mandujano as a partial requirement to obtain the Doctor of Science degree in Optics.

Multipolar analysis of electromagnetic scattering by high refractive index dielectric particles

Abstract approved by:

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez
Thesis Director

In this thesis, a study of problems of light scattering by dielectric particles of high index of refraction is presented. Of particular interest has been the excitation of the magnetic dipole moment in the particles, their interaction with other multipoles and the details of their dependence on the shape of the particle. To address these problems it was necessary to develop some theoretical and computational tools. In particular, the development of numerical techniques based on integral surface equations was essential for the work, both for the 2D and 3D cases. To validate the scattering calculations with our implementation in three dimensions, we present comparisons with the public domain software SCUFF-EM, which is very efficient. Using these tools, we show scattering calculations with particles of shapes other than the sphere and the infinite cylinder. Also, with the purpose of analyzing and describing electromagnetic scattering in more detail, we developed a method that allowed us to analyze the scattered field in terms of its multipolar contributions. In particular, they are used in three applications of high refractive index dielectric particles such as, in the design of magnetic mirrors, in the analysis of the role played by the excitation of different multiples in the generation of second harmonics and the study of resonances of Fano in long finite cylinders.

Keywords: Scattering, Method of moments, Multipolar Decomposition, High refractive index, Dielectrics, Magnetic Resonance

Dedicatoria

A Cynthia por su paciencia, aliento y cariño

A mis padres por su apoyo

Agradecimientos

Al Dr. Eugenio Méndez por su guía y su sentido del humor sarcástico. Que sin frases de aliento como: *es lo que hay* y *ya que se están yendo se vuelven útiles*, no hubiera sido lo mismo esta aventura.

A los miembros de mi comité de tesis, al Dr. José A. Sánchez Gil, al Dr. Francisco Villa, al Dr. Demetrio Macias y al Dr. Pedro Negrete. Gracias por esos avances de tesis tan motivantes y divertidos.

A mi bella esposa Cynthia que sin su paciencia y apoyo, no sería posible este trabajo.

A mis compañeros y amigos de CICESE, Ángel, Alma, Ceci, Gaby, Nayeli, Liliana, Yahaira, Jano y Ochoa.

Al gobierno español y al CSIC por su apoyo para mi estancia en España mediante el proyecto NANOPHOTOPLAS, i-COOP LIGHT 2015CD0011 .

Al Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada por permitirme realizar mis estudios de doctorado y a los profesores del posgrado por su guía y enseñanzas.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por brindarme el apoyo económico para realizar mis estudios de doctorado. No. de becario: 227727

A ti lector que probablemente quieres implementar y/o entender el SIE. Te deseo suerte y mucha paciencia, que sin alguna de éstas no sale, créeme.

Tabla de contenido

	Página
Resumen en español	ii
Resumen en inglés	iii
Dedicatoria	iv
Agradecimientos	v
Lista de figuras	viii
Lista de tablas	xiii
Capítulo 1. Introducción	
1.1. Estructura de la tesis	3
Capítulo 2. Teoría y conceptos básicos	
2.1. Ecuaciones de Maxwell	6
2.2. Formulación del problema de esparcimiento electromagnético	7
2.2.1. Condiciones de frontera	8
2.2.2. El principio de equivalencia superficial	9
2.3. Secciones transversales y eficiencias	10
Capítulo 3. Solución analítica para problemas de esparcimiento electromagnético	
3.1. Ecuación de Helmholtz y vectores armónicos	14
3.2. Esparcimiento EM por una partícula esférica	15
3.2.1. El campo lejano	18
3.3. Esparcimiento EM por un cilindro infinito	25
Capítulo 4. Formulación en términos de ecuaciones integrales de superficie	
4.1. Ecuaciones de Stratton-Chu en términos de las corrientes equivalentes	30
4.2. Formulación integral PMCHW	35
4.3. Discretización de las corrientes equivalentes	36
4.4. Evaluación de la función de Green y tratamiento especial de los puntos singulares	38
4.5. Cálculo de la eficiencia de esparcimiento	39
4.6. Validación de los resultados numéricos	40
4.7. Resonancias de Fano en cilindros finitos dieléctricos	45
Capítulo 5. Método para la descomposición multipolar del campo esparcido	
5.1. Descomposición multipolar caso 3D	51
5.1.1. Cálculo numérico de los coeficientes en 3D	54

5.2.	Descomposición multipolar - Caso 2D	56
5.3.	Espejo dieléctrico magnético	60
5.3.1.	Análisis de una sola partícula	61
5.3.2.	Estructura periódica	65

Capítulo 6. Descomposición multipolar del segundo armónico

6.1.	Métodos teóricos	71
6.1.1.	Fuentes no lineales en la GSA	71
6.1.2.	Modelo de susceptibilidades no lineales para dieléctricos (di- pollium)	73
6.1.3.	Descomposición del campo esparcido	76
6.1.4.	Eficiencia de esparcimiento del segundo armónico	78
6.2.	GSA por partículas simétricas	80
6.3.	Efecto de los multipolos de la frecuencia fundamental en la GSA	85
6.4.	Partículas con secciones transversales no circulares	86

Capítulo 7. Resumen y conclusiones

Literatura citada	93
------------------------------------	----

Apéndice	98
A. Método de momentos	98
B. Fórmulas de cuadratura gaussiana para triángulos	100
C. Elementos de matriz en términos de la función de Green escalar	102
D. Descomposición multipolar caso 3D a la Bohren	103
E. GSA por un cilindro infinito en incidencia normal	104
F. Estructura de los códigos	106

Lista de figuras

Figura	Página
1. Ilustración del problema de esparcimiento electromagnético.	8
2. Principio de equivalencia superficial exterior e interior. Adaptado de (Medgyesi, 1994).	10
3. Esferas virtuales en medios no absorbentes. a) Esfera virtual en la presencia de un flujo electromagnético. b) Esfera virtual a la que se le introduce una partícula en la presencia de un flujo electromagnético.	11
4. Situación física considerada, una esfera de radio R es iluminada por una onda plana. El origen del sistema de coordenadas está en el centro de la partícula.	17
5. Eficiencia de esparcimiento total y por multipolo para una esfera de Si con radio $R = 200$ nm.	22
6. Cálculos de la sección transversal de radar a longitudes de onda de la resonancias para la esfera de la figura 5. En la columna izquierda para la excitación del cuadrupolo eléctrico (@806 nm) y en la columna derecha del cuadrupolo magnético (@1005 nm).	23
7. Cálculos de la sección transversal de radar a longitudes de onda de la resonancias para la esfera de la figura 5. En la columna izquierda para la excitación del dipolo eléctrico (@1108 nm) y en la columna derecha del dipolo magnético (@1457 nm).	24
8. Situación física considerada, cilindro infinito de radio R es iluminado por una onda plana polarizada en p o s . El origen del sistema de coordenadas está centro de la partícula.	25
9. Eficiencia de esparcimiento para un cilindro infinito de Si con $R = 200$ nm en polarización p . a_0 corresponde al dipolo magnético, a_1 al dipolo eléctrico y a_2 al cuadrupolo eléctrico. Presentamos los patrones angulares de esparcimiento para los máximos de la eficiencia.	27
10. Mapas de falso color del modulo del campo magnético (columna izquierda) y del campo eléctrico (columna derecha), a las longitudes de onda de los máximos de la eficiencia de esparcimiento. Se observan las excitaciones multipolares 1872 nm (dipolo magnético), a 1230 nm (dipolo eléctrico) y a 902 nm (cuadrupolo eléctrico).	28
11. Eficiencia de esparcimiento para un cilindro infinito de Si con $R = 200$ nm en polarización s . En donde a_0 corresponde a la eficiencia del dipolo eléctrico y a_1 a la del dipolo magnético. Presentamos los patrones angulares de esparcimiento en los máximos de la eficiencia de esparcimiento.	29
12. Bosquejo del problema equivalente.	31
13. Funciones base RWG definidas para una pareja de lados que comparten un lado L_n	37
14. Bosquejo de iluminación y del mallado triangular de la superficie de la esfera.	41

15. Comparación entre el SIE y la solución de Mie para la sección transversal de radar para un plano paralelo y perpendicular en dB , con un parámetro de tamaño de $x = \pi$, $\lambda = 2$ y $R = 0.5$, para un dieléctrico de $\epsilon = 4$ de lado izquierdo y un dieléctrico de $\epsilon = 16$ del lado derecho. 42
16. Comparación para la sección transversal de radar del plano perpendicular (paralelo) del lado derecho (izquierda) en dB , entre el SIE (línea discontinua roja), el código scuff-em (línea discontinua verde) y la solución tipo Mie (línea continua negra) con un parámetro de tamaño de $x = \pi$, $\lambda = 1$, $R = 1.0$, y $\epsilon = 16$ 42
17. Comparación de la eficiencia esparcida para una esfera de Si de radio 200 nm, entre el SIE (línea discontinua negra), el código scuff-em (línea continua con puntos verde) y la solución tipo Mie (línea continua roja). . . . 43
18. Comparación de la eficiencia esparcida para una cubo de Si de lado de 400 nm, entre el SIE (línea discontinua negra) y el código scuff-em (línea discontinua verde). Se ilustra la geometría del problema de esparcimiento. 44
19. Comparación entre el MoM y la solución de Mie para la eficiencia de esparcimiento por un cilindro infinito de Si con $R = 200$ nm en (a) polarización p y (b) polarización s 44
20. Mapas de falso color de la dependencia espectral de la eficiencia de esparcimiento Q_{sc} para un nanoalambre semiconductor finito ($n = 3.5$) de radio $R = 80$ nm en iluminación normal, variando el largo L . En polarización p o TE (arriba) y en polarización s TM (abajo). La condición de la resonancia de Fabry-Perot de los correspondientes modos guiados está superpuesta (curvas discontinuas de color). 47
21. Dependencia espectral de la eficiencia de esparcimiento Q_{sc} en iluminación normal (modo p) para el nanoalambre semiconductor ($n = 3.5$) de radio $R = 80$ nm y largo de $L = 600$ nm, calculado numéricamente con el scuff-em (línea continua azul). También se incluyen cálculos analíticos para un cilindro de largo infinito del mismo radio (línea discontinua verde). Se incluyen cálculos del campo total dentro del cilindro para diferentes longitudes de onda que corresponden a las resonancias de Mie y de Fabry-Perot. 48
22. Dependencia espectral de la eficiencia de esparcimiento Q_{sc} en iluminación normal (modo s) para el nanoalambre semiconductor ($n = 3.5$) de radio $R = 80$ nm y largo de $L = 500$ nm, calculado numéricamente con el scuff-em (línea continua azul). También se incluyen cálculos analíticos para un cilindro de largo infinito del mismo radio (línea discontinua verde). Se incluyen cálculos del campo total dentro del cilindro para diferentes longitudes de onda que corresponden a las resonancias de Mie y de Fabry-Perot. 48
23. Comparación de la eficiencia esparcida calculada con el software Scuff-em y el SIE para un cilindro dieléctrico ($n = 3.5$) de 600 nm de largo y un radio de 80 nm iluminado en polarización p 49

Figura	Página
24. Comparación de la eficiencia esparcida calculada con el software Scuffem y el SIE para un cilindro dieléctrico ($n = 3.5$) de 600 nm de largo y un radio de 80 nm iluminado en polarización s	50
25. Magnitud al cuadrado de los campos esparcidos por una esfera de radio $R = 230$ nm de Si. El campo eléctrico (izquierda) y el campo magnético (derecha), obtenidos en una esfera virtual de radio $r_0 = 300$ nm.	55
26. Sección transversal de radar para un cubo de Si de lado $L = 4 \mu\text{m}$ a $\lambda = 1700$ nm. Se observa el patrón de radiación en el que domina la contribución del dipolo magnético.	56
27. Ilustración de la situación física considerada. El eje x_2 es perpendicular al plano de la figura.	57
28. Patrones angulares de los primeros coeficientes de Mie, simétricos y antisimétricos. El signo del campo en la figura corresponde al campo que esté a lo largo del eje de simetría x_2	58
29. Patrones de radiación del campo cercano y lejano de un dipolo magnético, dipolo eléctrico y un cuadrupolo eléctrico en polarización p . Las líneas de flujo corresponden a las líneas del campo eléctrico.	62
30. Eficiencia de esparcimiento total y de los primeros tres multipolos para una partícula rectangular (arriba), y una partícula cilíndrica (abajo). Asumimos que iluminamos con una onda plana con polarización p y que el medio de las partículas es silicio. La partícula rectangular tiene dimensiones $420 \text{ nm} \times 316 \text{ nm}$ y el diámetro del cilindro es de 420 nm.	63
31. Propiedades del esparcimiento de la partícula rectangular considerada en la figura 30. (a) Fase relativa del esparcimiento hacia atrás de los primeros tres multipolos. (b) Mapa de densidad de la intensidad del campo eléctrico total a $\lambda = 940$ nm. (c) Patrón angular de esparcimiento para el campo lejano a $\lambda = 940$ nm.	64
32. Propiedades del esparcimiento de la partícula cilíndrica considerada en la figura 30. (a) Fase relativa del esparcimiento hacia atrás de los primeros tres multipolos. (b) Mapa de densidad de la intensidad del campo eléctrico total a $\lambda = 925$ nm. (c) Patrón angular de esparcimiento para el campo lejano a $\lambda = 925$ nm.	65
33. Mapa de la intensidad del campo eléctrico total para (a) dos y (b) cuatro partículas rectangulares como las consideradas en la figura 30 a $\lambda = 940$ nm. La distancia entre los centros de los rectángulos es de 576 nm.	66
34. Reflectividad (línea punteada azul) y fase relativa de la onda reflejada (línea punteada roja) para un arreglo infinito de partículas con sección transversal (a) rectangular de $420 \text{ nm} \times 316 \text{ nm}$ y (b) cilíndrica de diámetro de 420nm. El periodo en ambos casos es de $\Lambda = 576$ nm.	67

Figura	Página
35. Reflectividad y diferencia de fase entre el campo incidente y reflejado para la estructura periódica de rectángulos como función de el periodo y la longitud de onda. (a) Reflectividad, (b) diferencia de fase tomando como referencia el centro de las partículas, y (c) diferencia de fase tomando como referencia la parte de arriba de las partículas.	68
36. Intensidad del campo eléctrico total en reflexión de una onda plana por un arreglo infinito de partículas rectangulares comparado con un espejo de oro. (a) $\lambda = 940$ nm y $\lambda = 1064$ nm. El periodo de la rejilla es de $\Lambda = 0.576$ μm y las partículas tienen dimensiones de 420 nm \times 316 nm.	69
37. Situación física y geometría del problema.	71
38. Función dieléctrica del Si, se muestran los datos experimentales de Palik (Palik, 1998) y un ajuste basado en un oscilador con $F = 3.65 \times 10^{32}\text{s}^{-2}$, $\omega_0 = 5.9 \times 10^{15}\text{s}^{-1}$ y $\Gamma = 3.0 \times 10^{14}\text{s}^{-1}$	77
39. Ilustración de los primeros multipolos simétricos y antisimétricos con respecto a la dirección de iluminación.	79
40. Ilustración de situaciones en donde el campo esparcido en el segundo armónico se asume a) simétrico y b) antisimétrico.	81
41. Eficiencia esparcida a la frecuencia fundamental para un cilindro infinito de radio 150 nm. Se muestran las contribuciones de los primeros tres multipolos excitados. Debido a la simetría sólo se excitan multipolos de la base par.	82
42. Eficiencia de esparcimiento (a) no lineal y (b) lineal para el cilindro considerado en la figura 41. Para la GSA sólo se excitan multipolos de la base impar, mientras para el caso lineal de la base par. Se ilustra para el caso no lineal el patrón angular en las resonancias multipolares.	83
43. Módulo del campo magnético del segundo armónico para valor máximo del dipolo magnético ($\lambda/2 = 977$ nm) del cilindro considerado en la figura 41. Observamos que incluso en la resonancia de dipolo eléctrico, la contribución que predomina es la del cuadrupolo eléctrico.	84
44. Eficiencia de esparcimiento de la GSA para el cilindro considerado en la figura 41, en donde consideramos los efectos de los multipolos a la frecuencia fundamental. En la línea verde punteada consideramos sólo la contribución dipolar eléctrica, en la línea continua gris consideramos todos los multipolos excepto el dipolar eléctrico, y la línea punteada azul esta dada por las contribuciones del dipolo y cuadrupolo eléctricos.	86
45. Eficiencia de la GSA para una partícula dieléctrica cuadrada de lado de 300 nm. También se muestran las primeras tres contribuciones multipolares a la eficiencia. Se ilustra el patrón angular de cada resonancia.	87

Figura	Página
46. Módulo del campo magnético en el campo cercano de la partícula con sección transversal cuadrada de la figura 45 en $\lambda/2 = 1052$ nm, que coincide con el máximo de la resonancia del dipolo eléctrico a la longitud de onda del segundo armónico.	88
47. Módulos del campo magnético en el campo cercano de la partícula de sección transversal triangular para diferentes orientaciones a 626 nm, que coincide con la resonancia del cuadrupolo eléctrico. La orientación simétrica de la partícula se muestra (a), mientras (b), (c) y (d) corresponden a rotaciones de 10, 20 y 30 grados.	89
48. Regla de cuadratura gaussiana de tres puntos (2/3, 1/3, 1/3). A cada permutación se le asocia el mismo peso de 1/3. Como se ilustra en la tabla 5.	100

Lista de tablas

Tabla	Página
1. Primeros coeficientes eléctricos y magnéticos para una esfera de radio $R = 230$ nm a la resonancia del dipolo eléctrico @ $\lambda = 1272$ nm. El superíndice <i>D.M.</i> indica los coeficientes calculados numéricamente, mientras que el superíndice <i>Mie</i> indica los coeficientes obtenidos con la solución analítica.	55
2. Primeros coeficientes eléctricos y magnéticos para una cubo de lado $L = 400$ nm a la resonancia del dipolo magnético @ $\lambda = 1700$ nm. . . .	56
3. Valores de los coeficientes de la expansión multipolar del campo esparcido en el segundo armónico (Figura 47) a $\lambda/2=626$ nm. Por simplicidad, el factor común $1/(n_B e)$ se omitió de los valores mostrados.	89
4. Regla de cuadratura gaussiana de un punto (punto medio).	101
5. Regla de cuadratura gaussiana de tres puntos.	101
6. Regla de cuadratura gaussiana de siete puntos.	101
7. Regla de cuadratura gaussiana de trece puntos.	101

Capítulo 1. Introducción

Los avances recientes en técnicas de fabricación y caracterización de estructuras a escalas nanométricas han permitido el desarrollo de la nano-óptica (Novotny y Hecht, 2006), que constituye actualmente un área de investigación muy activa y de gran relevancia científica y tecnológica. A nivel básico, la nano-óptica involucra la interacción de luz con partículas y estructuras más pequeñas que la longitud de onda. Un caso importante, y muy estudiado, es el de partículas metálicas de unos cuantos nanómetros que presentan resonancias plasmónicas (Maier, 2007). Estas estructuras resonantes pueden ser consideradas como nanoantenas ópticas (Bharadwaj *et al.*, 2009; Novotny y Van Hulst, 2011; Schuller *et al.*, 2010), pues permiten concentrar energía electromagnética propagante en regiones muy pequeñas. Las partículas o estructuras resonantes, constituyen también la base sobre la que se diseñan los metamateriales ópticos (Cai y Shalaev, 2010; Capolino, 2017). Éstos, son materiales artificiales cuyas propiedades ópticas pueden ser muy distintas a las de los materiales encontrados en la naturaleza. Ejemplos clásicos de esto son los vidrios con inclusiones metálicas utilizados en los vitrales de las catedrales medievales. Se trata de un caso en el que se excitan resonancias plasmónicas, cuya naturaleza se debe, primordialmente, a excitaciones de carácter eléctrico.

Recientemente, ha existido un creciente interés por las propiedades ópticas de nanopartículas dieléctricas de alto índice de refracción, ya que en este tipo de partículas es posible excitar resonancias de carácter magnético, al igual que resonancias eléctricas (Zhao *et al.*, 2009; Kuznetsov *et al.*, 2012). Además, este tipo de estructuras presenta pocas pérdidas comparadas con las partículas metálicas. Ésto abre nuevas posibilidades para el diseño de metamateriales y metasuperficies de baja absorción (Decker y Staude, 2016). Cabe señalar que las excitaciones magnéticas en medios de alto índice de refracción ocurren incluso para estructuras simples como esferas o cilindros infinitos, para los que existe una solución analítica para el problema de esparcimiento electromagnético (Mie, 1908). Empleando esta teoría, se ha demostrado que las nanopartículas de silicio soportan excitaciones del tipo eléctrico y magnético en un rango espectral entre el visible e infrarrojo cercano (García-Etxarri *et al.*, 2011; Kuznetsov *et al.*, 2012). También, se ha demostrado teórica y después verificado experimentalmente, que la interferencia entre excitaciones eléctricas y magnéticas puede

emplearse para controlar el patrón angular de radiación, por ejemplo, para conseguir un esparcimiento unidireccional, frontal o hacia atrás (Geffrin *et al.*, 2012; Fu *et al.*, 2013).

Otros fenómenos interesantes observados en metasuperficies dieléctricas de alto índice de refracción que dependen de la interferencia entre resonancias eléctricas y magnéticas son, por ejemplo, metasuperficies que se comportan como espejos magnéticos (espejos cuya diferencia de fase entre el campo el campo incidente y reflejado es de cero) (Liu *et al.*, 2014), y metasuperficies que teóricamente presentan un efecto general de Brewster (Paniagua-Domínguez *et al.*, 2016).

Asimismo, se han empleado las resonancias magnéticas para incrementar la señal de efectos no lineales como la generación del tercer armónico por nanopartículas de silicio (Shcherbakov *et al.*, 2014).

Motivados por lo anterior, en esta tesis presentamos un estudio de las propiedades de esparcimiento de partículas dieléctricas de alto índice de refracción en dos y tres dimensiones. Analizamos el efecto producido en las resonancias al cambiar: la geometría de la partícula, el tamaño, la longitud de onda y el índice de refracción de la partícula.

Para realizar esto, fue necesario desarrollar programas de cálculo electromagnético adecuados al problema. Actualmente existen varios métodos computacionales en tres dimensiones para estudiar la respuesta óptica de nanoestructuras con geometrías arbitrarias. En particular, los enfoques como el método de diferencias finitas y el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD por sus siglas en inglés), requieren de la discretización tanto del volumen esparcidor como de su alrededor. Esto conlleva a la necesidad de utilizar un gran poder computacional que resulta impráctico cuando el dominio computacional abarca varias longitudes de onda. Otros métodos, basados en ecuaciones integrales de volumen, como la aproximación por dipolos discretos (DDA por sus siglas en inglés) sólo necesitan discretizar el objeto esparcidor pero sufren de un alto costo en memoria a medida que el mallado aumenta, además de que son muy sensibles a inestabilidades producidas por variaciones espaciales abruptas en la permitividad.

Recientemente, se ha empleado con éxito en la región óptica del espectro un forma-

lismo que reduce el número de incógnitas asociadas a la discretización y, consecuentemente, los requerimientos computacionales para resolver el problema. Esto se logra al transformar las ecuaciones integrales de volumen por una formulación de ecuaciones integrales de superficie (Rodríguez-Oliveros y Sánchez-Gil, 2011; Solis *et al.*, 2014; Kern y Martin, 2009). Este tipo de formalismo ha demostrado ser adecuado para tratar partículas con dimensiones de varias longitudes de onda y para partículas dieléctricas de alto índice (Kern y Martin, 2009), por lo que resulta entonces más conveniente que los métodos integrales de volumen (Kottmann y Martin, 2000). Por todo lo anterior, la formulación basada en integrales de superficie constituirá el método a desarrollar y utilizar en este trabajo.

También, con el propósito de analizar y describir a más detalle el esparcimiento electromagnético, desarrollamos una técnica para descomponer el campo esparcido de una partícula aislada, iluminada por una onda plana monocromática, en términos de sus contribuciones multipolares eléctricas y magnéticas. Esta descomposición multipolar nos dará información de cómo se distribuye la carga en la partícula y nos ayudará a entender la forma del campo lejano. Incluso, al sintonizar uno u otro multipolo nos permitirá controlar hasta cierto punto la forma del campo lejano. También, empleando el análisis multipolar nos permitirá discernir entre efectos debidos a una partícula aislada o a un arreglo de ellas.

Además, para el caso de partículas 2D de materiales dieléctricos presentamos un desarrollo del problema del segundo armónico. Para esto, nos enfocamos en el caso del silicio, modelando su respuesta lineal mediante un ajuste basado en un oscilador de Lorentz y, la respuesta no lineal, en términos del modelo conocido como el *Dipollium*.

En particular, empleamos las herramientas anteriormente mencionadas, en el diseño de espejos magnéticos, en el análisis del papel que juega la excitación de diferentes multipolos en la generación del segundo armónico y en el estudio de la resonancia de Fano en cilindros finitos.

1.1. Estructura de la tesis

La tesis está organizada de la siguiente manera. En el capítulo 2 definimos la teoría y conceptos básicos que usaremos a lo largo de todo el trabajo. También formulare-

mos el problema a resolver en este trabajo que consiste en el llamado problema de esparcimiento electromagnético.

En el capítulo 3 presentamos la solución analítica para dos problemas de esparcimiento; para una partícula esférica y para un cilindro infinito. Estas soluciones nos servirán como punto de referencia para validar nuestros resultados numéricos. Además, estas soluciones analíticas constituirán la base para desarrollar el método de descomposición multipolar.

En el capítulo 4 presentamos una derivación del método de la ecuación de superficie. Discutimos algunos detalles técnicos de la implementación y mostramos algunas comparaciones con los resultados obtenidos con la solución analítica. También presentamos un estudio del esparcimiento de cilindros finitos dieléctricos en las que observamos resonancias de Fano muy intensas (Abujetas *et al.*, 2017). Para los cálculos numéricos de este trabajo empleamos otra implementación del método de la ecuación integral representada por el software gratuito Scuff-em (Reid y Johnson, 2015). Estos resultados los usamos como punto de comparación entre nuestra implementación y el software Scuff-em.

En el capítulo 5 desarrollamos una técnica de descomposición multipolar para el caso de partículas de tres o dos dimensiones. Presentamos algunos ejemplos de esparcimiento en los que calculamos las contribuciones multipolares. Finalmente, presentamos un trabajo en el que empleamos el análisis mutipolar en dos dimensiones para encontrar las condiciones en las que se puede diseñar un espejo magnético (la diferencia de fase del campo eléctrico reflejado e incidente es de cero), con una estructura dieléctrica periódica sublongitud de onda (González-Alcalde *et al.*, en revisión 2019).

En el capítulo 6 estudiamos la generación de segundo armónico (GSA) producido por partículas 2D centrosimétricas hechas de un material de alto índice de refracción. Calculamos los campos a la frecuencia fundamental y del segundo armónico, y empleamos la descomposición multipolar para estudiar los multipolos excitados en las partículas. Esto nos permite estudiar la excitación de los multipolos a la frecuencia del segundo armónico y analizar el efecto de los multipolos excitados en ω en los de 2ω (Mandujano *et al.*, 2019).

Finalmente, en el capítulo 7 presentamos las conclusiones principales de este trabajo. En particular, nos enfocamos en discutir los resultados de las resonancias de Fano, el espejo magnético y la descomposición multipolar del segundo armónico.

Capítulo 2. Teoría y conceptos básicos

En este capítulo mostramos los conceptos básicos de la teoría electromagnética que utilizamos en las formulaciones de los siguientes capítulos. Presentamos el problema a resolver en este trabajo, conocido como *el problema del esparcimiento electromagnético*. Asimismo, introducimos el llamado *principio de equivalencia* que empleamos para reformular el problema de esparcimiento en términos de corrientes equivalentes de superficie o fuentes ficticias. Finalmente presentamos las cantidades ópticas con las describiremos el esparcimiento electromagnético de una partícula (o colección de ellas), que son las *secciones transversales*.

2.1. Ecuaciones de Maxwell

La interacción de la materia y las ondas electromagnéticas puede ser entendida desde un punto de vista clásico a través de las *ecuaciones de Maxwell*. Estas ecuaciones son el fundamento para resolver problemas electromagnéticos. En forma diferencial y suponiendo que los campos poseen una dependencia armónica en el tiempo ($e^{-i\omega t}$) pueden escribirse en el sistema internacional de unidades como

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

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega), \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (4)$$

en donde \mathbf{E} y \mathbf{H} representan los campos eléctrico y magnético, \mathbf{D} el desplazamiento del campo eléctrico, \mathbf{B} el vector de inducción magnética, mientras que ρ y \mathbf{j} representan las fuentes de los campos, que son las densidades por unidad de volumen de carga y de corriente respectivamente.

En este trabajo, a menos de que se indique lo contrario, los medios estudiados se consideran como lineales, isotrópicos, homogéneos y dispersivos. Bajo estas conside-

raciones, las relaciones constitutivas tienen una relación escalar local de la forma

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

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

en donde ϵ y μ representan las constantes (o funciones) dieléctrica y magnética respectivamente. En las ecuaciones anteriores utilizamos la representación en el dominio de las frecuencias; para pasar de una representación en el dominio del tiempo al de frecuencias se utiliza la transformada de Fourier.

Para resolver problemas electromagnéticos es muy útil obtener una ecuación en la que sólo aparece el campo eléctrico o magnético. Esto se logra aplicando el operador rotacional en las ecuaciones (2) y (3), y combinando con las ecuaciones (1) y (4), encontrándose que

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) - k_i^2 \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = i\omega\mu\mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (7)$$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{H}_i(\mathbf{r}) - k_i^2 \mathbf{H}_i(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (8)$$

en donde el subíndice i hace referencia a la región estudiada y $k_i = \omega\sqrt{\epsilon_i\mu_i}$ es el número de onda en el medio.

Las ecuaciones (7) y (8) constituyen un punto de partida para resolver problemas de esparcimiento electromagnético. Sin embargo, sólo pueden resolverse de forma analítica para algunas geometrías como el caso de superficies planas, partículas esféricas o cilindros infinitos (Capítulo 3). En general, para geometrías y condiciones de iluminación más complejas es necesario recurrir a métodos numéricos para obtener soluciones aproximadas.

2.2. Formulación del problema de esparcimiento electromagnético

En la teoría del esparcimiento se busca obtener la respuesta electromagnética de la interacción entre una onda incidente y una partícula o superficie de geometría, tamaño y propiedades ópticas específicas (Figura 1). El problema directo consiste en encontrar el campo esparcido, dado un campo de iluminación y un objeto con geometría y propiedades ópticas conocidas. El campo esparcido puede presentar grandes

cambios cuando se modifican parámetros de incidencia como la forma del haz, su longitud de onda y la polarización, así como la función dieléctrica y la geometría del objeto esparcidor. Como mencionamos anteriormente, sólo ciertos casos en los que el objeto tiene una gran simetría pueden estudiarse de manera analítica. Fuera de estos casos es necesario emplear técnicas computacionales; en particular, en este trabajo se utilizan métodos rigurosos basados en las ecuaciones de Maxwell y en sus condiciones de frontera.

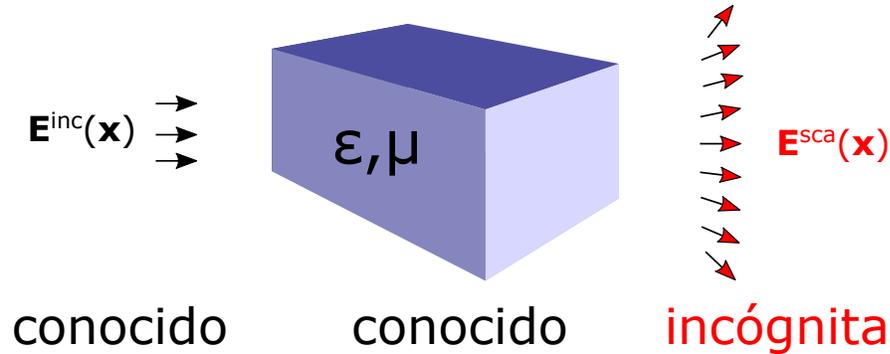


Figura 1. Ilustración del problema de esparcimiento electromagnético.

2.2.1. Condiciones de frontera

Cuando se tienen problemas en los que existe una interfase que separa dos medios con distintas propiedades ópticas, existe una relación entre los campos electromagnéticos a ambos lados de la interfaz. Si tenemos una superficie S que separa dos medios dieléctricos de ϵ_i, μ_i con $i = 1, 2$, se puede mostrar de las ecuaciones de Maxwell en su forma integral que los campos cumplen lo siguiente

$$\hat{n}_i \times (\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2)|_S = 0, \quad (9)$$

$$\hat{n}_i \times (\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2)|_S = 0, \quad (10)$$

donde \hat{n}_i representa el vector normal a la superficie. Las ecuaciones (9) y (10) indican que las componentes tangenciales de los campos eléctricos y magnéticos deben ser continuas a través de la interfaz entre dos medios (Jackson, 2012). Se puede demostrar que, si se cumplen las ecuaciones anteriores, automáticamente se cumple con la conservación de energía en la superficie y que la solución es única (Teorema de unicidad).

Para el caso específico en el que S represente un conductor eléctrico perfecto, se

necesita agregar una densidad de corriente eléctrica superficial \mathbf{J}_s en el lado derecho de la ecuación (10). Similarmente, cuando S representa un conductor magnético perfecto se agrega una densidad magnética superficial \mathbf{M}_s del lado derecho de la ecuación (9).

2.2.2. El principio de equivalencia superficial

El principio de equivalencia superficial o de superficie, permite reformular los problemas en los que existen fuentes reales como una antena o un emisor, en términos de unas corrientes equivalentes o densidades de corrientes superficiales. Estas fuentes ficticias son llamadas equivalentes ya que dentro de la región analizada producen los mismos campos que las fuentes originales (Schelkunoff, 1939).

Para entender el principio de equivalencia consideremos el problema de esparcimiento para dos regiones ilustrado en la figura 2. En la región R_1 las fuentes generan los campos incidentes \mathbf{E}_{inc} y \mathbf{H}_{inc} que interactúan con un obstáculo representado por la región R_2 y delimitado por la superficie S .

La idea es reformular el problema de esparcimiento como un problema exterior y uno interior a S . Para el caso del problema exterior (en R_1) las fuentes reales son reemplazadas por las densidades de corrientes superficiales \mathbf{J}_1 y \mathbf{M}_1 que se encuentran por fuera de S . Estas corrientes exteriores satisfacen que:

$$\mathbf{J}_1 = \hat{n}_1 \times \mathbf{H}_1|_{S_1}, \quad (11)$$

$$\mathbf{M}_1 = -\hat{n}_1 \times \mathbf{E}_1|_{S_1}. \quad (12)$$

Para el problema interior (en R_2) se considera que las corrientes se encuentran por dentro de S y satisfacen que

$$\mathbf{J}_2 = \hat{n}_2 \times \mathbf{H}_2|_{S_2}, \quad (13)$$

$$\mathbf{M}_2 = -\hat{n}_2 \times \mathbf{E}_2|_{S_2}. \quad (14)$$

Si se emplean las condiciones de frontera de las componentes tangenciales (9) y (10), se puede observar que las corrientes equivalentes exteriores e interiores obedecen que $\mathbf{J}_s = -\mathbf{J}_1 = \mathbf{J}_2$ y $\mathbf{M}_s = -\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_2$.

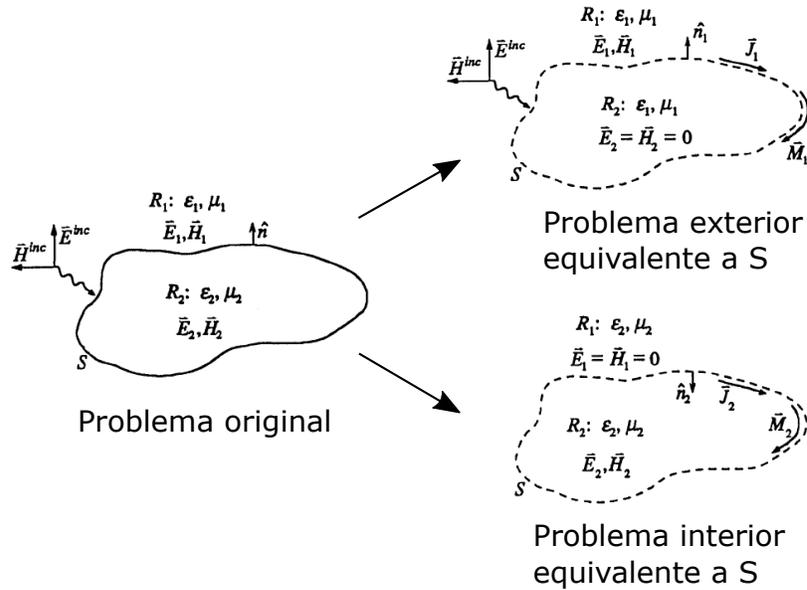


Figura 2. Principio de equivalencia superficial exterior e interior. Adaptado de (Medgyesi, 1994).

Las corrientes equivalentes inducen los mismos campos \mathbf{E} y \mathbf{H} que generaría el problema real (Balanis, 2012), por lo que esencialmente reduce el problema de esparcimiento al cálculo de las densidades de corrientes superficiales \mathbf{J}_S y \mathbf{M}_S . Al calcular e integrar estas corrientes se obtienen los campos esparcidos \mathbf{E}_{SC} y \mathbf{H}_{SC} (Capítulo 4).

2.3. Secciones transversales y eficiencias

Una vez que se han calculado los campos podemos obtener la respuesta del sistema con la secciones transversales (Bohren y Huffman, 2008). Para definir estas cantidades, consideramos una esfera imaginaria con radio r_0 en un medio no absorbente (Figura 3-a)). Esta esfera virtual es atravesada por un flujo electromagnético incidente descrito por los campos \mathbf{E}_{inc} , \mathbf{H}_{inc} .

Para calcular la potencia incidente podemos emplear el promedio temporal del vector de Poynting:

$$\langle \mathbf{S}_{inc}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{2} \Re \{ \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{inc}^*(\mathbf{r}) \}, \quad (15)$$

que representa el flujo de potencia electromagnética en \mathbf{r} (potencia/área) promediada sobre el tiempo de respuesta de un detector óptico (mucho mayor que el periodo de oscilación). La magnitud de esta cantidad se le conoce como irradiancia I .

Al integrar la ecuación (15) sobre la esfera virtual, obtenemos la potencia total que

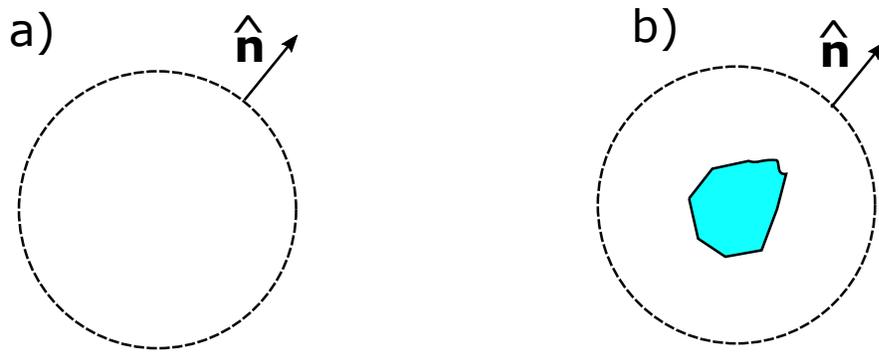


Figura 3. Esferas virtuales en medios no absorbentes. a) Esfera virtual en la presencia de un flujo electromagnético. b) Esfera virtual a la que se le introduce una partícula en la presencia de un flujo electromagnético.

crucza la superficie como

$$W_{inc} = \int_A \langle \mathbf{S}_{inc}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS = 0, \quad (16)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$ es el vector normal de la superficie de la esfera que apunta hacia afuera. Como el medio es no absorbente (sin divergencias) el flujo que entra a la esfera virtual es el mismo que el que sale.

Ahora, ponemos una partícula dentro de la esfera virtual (Figura 3-b)). Para este caso los campos totales fuera de la partícula son

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}), \quad (17)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{inc}(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_{sc}(\mathbf{r}). \quad (18)$$

Para este caso el promedio temporal del vector de Poynting es

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{2} \Re \{ \mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r}) \} = \langle \mathbf{S}_{inc}(\mathbf{r}) \rangle + \langle \mathbf{S}_{sc}(\mathbf{r}) \rangle + \langle \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (19)$$

donde empleamos las ecuaciones (17) y (18) y definimos las cantidades

$$\langle \mathbf{S}_{sc}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{2} \Re \{ \mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{sc}^*(\mathbf{r}) \}, \quad (20)$$

$$\langle \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{2} \Re \{ \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{sc}^*(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{inc}^*(\mathbf{r}) \}. \quad (21)$$

Integrando la ecuación (19) obtenemos

$$\int_A \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS = \int_A \langle \mathbf{S}_{inc}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS + \int_A \langle \mathbf{S}_{sc}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS + \int_A \langle \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS, \quad (22)$$

despejando el término con $\langle \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}) \rangle$, tenemos

$$-\underbrace{\int_A \langle \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS}_{W_{ext}} = -\underbrace{\int_A \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS}_{W_{abs}} + \underbrace{\int_A \langle \mathbf{S}_{sc}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS}_{W_{sc}}. \quad (23)$$

Definidos de esta manera, $W_{ext} > 0$, $W_{abs} > 0$ y $W_{sc} > 0$.

$$W_{ext} = W_{abs} + W_{sc}. \quad (24)$$

Esta ecuación puede interpretarse como la perturbación en la energía total por unidad de tiempo que ocurre cuando se introduce una partícula en un haz incidente. En otras palabras, la potencia extinguida (W_{ext}) se debe a los fenómenos de absorción (W_{abs}) y de esparcimiento (W_{sc}).

La ecuación (24), suele redefinirse al dividir entre la irradiancia incidente I_{inc} . Con esto se definen las cantidades conocidas como secciones transversales de la forma

$$C_{sc} = \frac{W_{sc}}{I_{inc}} = \frac{1}{I_{inc}} \int_A \langle \mathbf{S}_{sc}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS, \quad (25)$$

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_{inc}} = -\frac{1}{I_{inc}} \int_A \langle \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS, \quad (26)$$

$$C_{abs} = \frac{W_{abs}}{I_{inc}} = -\frac{1}{I_{inc}} \int_A \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS, \quad (27)$$

donde C_{sc} es la sección transversal de esparcimiento, C_{ext} la sección transversal de extinción y C_{abs} es la sección transversal de absorción. Estas cantidades tienen unidades de área.

Similarmente, a partir de las secciones transversales (25)-(27) podemos definir unas cantidades adimensionales usadas en óptica, al dividir por la sección transversal geométrica de la partícula proyectada a un plano perpendicular al haz incidente G

(área). Esto define las cantidades conocidas como eficiencias de la forma

$$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{G}, \quad Q_{sc} = \frac{C_{sc}}{G}, \quad Q_{abs} = \frac{C_{abs}}{G}. \quad (28)$$

Como veremos más adelante, las secciones transversales o las eficiencias nos permitirán analizar las resonancias que posea una partícula a determinadas longitudes de onda.

En el siguiente capítulo presentamos algunos resultados analíticos del problema de esparcimiento que nos servirán como un punto de comparación para validar y analizar los resultados numéricos obtenidos en este trabajo.

Capítulo 3. Solución analítica para problemas de esparcimiento electromagnético

Han pasado más de 100 años desde que Gustav Mie publicó la solución analítica para el problema del esparcimiento de una partícula esférica al iluminarse con una onda plana (Mie, 1908). La solución ha sido extendida para geometrías que permiten utilizar técnicas matemáticas de separación de variables como elipsoides y cilindros infinitos. A la fecha ha sido una gran herramienta para el desarrollo de muchas áreas científicas modernas; como la plasmónica, los metamateriales, la nanofotónica y recientemente para el estudio de materiales de alto índice de refracción. Esto último, debido al hecho de que las nanopartículas dieléctricas de alto índice poseen fuertes resonancias magnéticas, lo que ha abierto la posibilidad de nuevas alternativas para el diseño de metamateriales ópticos. Además, de que estos materiales presentan menores pérdidas, comparados con los metales.

En este capítulo presentamos las soluciones tipo Mie para dos tipos de geometrías; una partícula esférica y un cilindro infinito. Con estas soluciones tendremos un punto de referencia para comparar cálculos numéricos en tres y dos dimensiones. Los resultados analíticos se expresan como series multipolares cuyos primeros términos han sido bien estudiados y tienen interpretaciones físicas claras. Esta herramienta también nos permitirá identificar resonancias en partículas con geometrías más complejas (Capítulo 5).

3.1. Ecuación de Helmholtz y vectores armónicos

Suponiendo que estamos en una región libre de fuentes ($\rho = 0$ y $\mathbf{j} = \mathbf{0}$) y usando la identidad $\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$ en las ecuaciones (7) y (8), obtenemos las llamadas *ecuaciones de Helmholtz vectoriales* para los campos electromagnéticos:

$$(\nabla^2 + k_i^2) \begin{Bmatrix} \mathbf{E}_i \\ \mathbf{H}_i \end{Bmatrix} = 0. \quad (29)$$

El hecho que los campos cumplan con la ecuación (29), significa que obedecen la ecuación de onda e, implícitamente, que tienen una dependencia armónica en el tiempo.

La solución de Mie consiste en resolver las ecuaciones de Helmholtz vectoriales utilizando dos funciones auxiliares $\{\mathbf{M}, \mathbf{N}\}$, definidas como

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\psi), \quad (30)$$

$$\mathbf{N} = \frac{1}{k_i} \nabla \times \mathbf{M}, \quad (31)$$

donde \mathbf{c} representa un vector que se escoge de acuerdo a la simetría de la partícula y ψ es llamada la *función generadora de los vectores armónicos*, que depende de la elección del sistema de coordenadas (Bohren y Huffman, 2008).

Puede demostrarse que si la función ψ es solución de la ecuación de Helmholtz escalar

$$\nabla^2 \psi + k_i^2 \psi = 0, \quad (32)$$

los vectores armónicos \mathbf{M} y \mathbf{N} satisfacen la ecuación de Helmholtz vectorial y tienen divergencia cero. Es decir que

$$(\nabla^2 + k_i^2) \begin{Bmatrix} \mathbf{M} \\ \mathbf{N} \end{Bmatrix} = 0, \quad \nabla \cdot \begin{Bmatrix} \mathbf{M} \\ \mathbf{N} \end{Bmatrix} = 0. \quad (33)$$

La solución de ψ depende de la elección del sistema de coordenadas, que se escoge de acuerdo a la geometría de la partícula. Esto reduce el problema de esparcimiento por la partícula a la solución de la ecuación de Helmholtz por el método de separación de variables.

A continuación presentamos dos soluciones de interés para este trabajo; el caso de una partícula esférica y el de un cilindro infinito.

3.2. Esparcimiento EM por una partícula esférica

Consideramos el esparcimiento de luz por una partícula esférica, iluminada con una onda plana (Figura 4). La solución de este problema se obtiene al resolver la ecuación (32) en coordenadas esféricas por el método de separación de variables. Mie demostró que la solución se puede expresar en términos de una parte par ψ_{elm} y una impar ψ_{olm} ,

de acuerdo a su dependencia con el ángulo azimutal ϕ :

$$\psi \left\{ \begin{array}{c} e \\ o \end{array} \right\}_{lm} (r, \theta, \phi) \sim \left\{ \begin{array}{c} \cos l\phi \\ \sin l\phi \end{array} \right\} P_m^l(\cos \theta) Z_m(\rho). \quad (34)$$

donde $\rho = kr$, Z_m representa la función de Bessel esférica j_m para el campo adentro de la esfera y la función de Hankel esférica $h_m^{(1)}$ para el campo fuera de la esfera, P_m^l son los polinomios de Legendre de grado m y orden l , y m y l son enteros con $1 \leq m < \infty$ y $-m \leq l \leq m$.

Los vectores armónicos se obtienen al sustituir (34) en (30) y (31), donde para coordenadas esféricas $\mathbf{c} = \mathbf{r}$ (Apéndice D). Debido a que las funciones $\{\cos l\phi, \sin l\phi, P_m^l(\cos \theta) \text{ y } Z_m(\rho)\}$ son linealmente independientes los vectores armónicos generados son ortogonales, por lo que cualquier función vectorial que satisfaga la ecuación de Helmholtz puede expresarse como una combinación de los vectores armónicos \mathbf{M}_{lm} y \mathbf{N}_{lm} .

Si ahora consideramos que la partícula esférica es iluminada por una onda plana polarizada en $\hat{\mathbf{e}}_x$ que se propaga a lo largo del eje $\hat{\mathbf{e}}_z$ en el vacío ($\mathbf{E}_{inc} = E_0 e^{ikr \cos \theta} \hat{\mathbf{e}}_x$), podemos aplicar condiciones de frontera y propiedades de ortogonalidad para demostrar que los únicos vectores armónicos no nulos ocurren cuando $l = 1$ (Chen-To, 1994; Bohren y Huffman, 2008). Realizando lo anterior, los vectores armónicos se reducen a:

$$\mathbf{M} \left\{ \begin{array}{c} e \\ o \end{array} \right\}_{1m} (r, \theta, \phi) = \left\{ \begin{array}{c} -\sin \phi \\ \cos \phi \end{array} \right\} \pi_m(\cos \theta) Z_m(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\theta - \left\{ \begin{array}{c} \cos \phi \\ \sin \phi \end{array} \right\} \tau_m(\cos \theta) Z_m(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\phi, \quad (35)$$

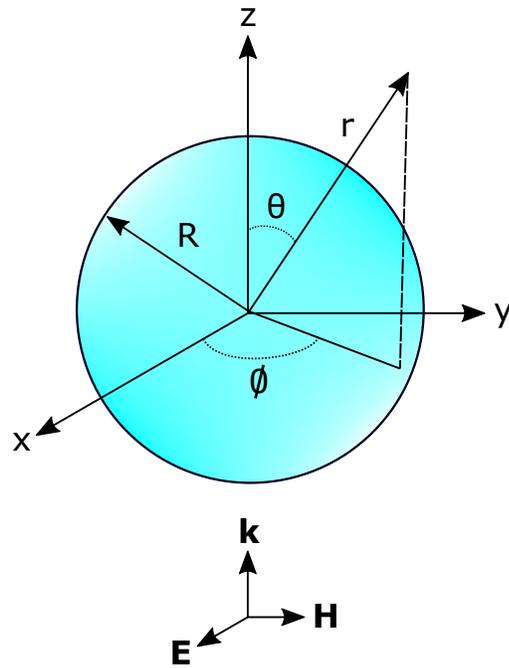


Figura 4. Situación física considerada, una esfera de radio R es iluminada por una onda plana. El origen del sistema de coordenadas está en el centro de la partícula.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{N} \begin{Bmatrix} e \\ o \end{Bmatrix}_{1m} (r, \theta, \phi) = & \begin{Bmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{Bmatrix} m(m+1) \sin \theta \pi_m(\cos \theta) \frac{Z_m(\rho)}{\rho} \hat{\mathbf{e}}_r \\
 & + \begin{Bmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{Bmatrix} \tau_m(\cos \theta) \frac{[\rho Z_m(\rho)]'}{\rho} \hat{\mathbf{e}}_\theta \\
 & + \begin{Bmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \end{Bmatrix} \pi_m(\cos \theta) \frac{[\rho Z_m(\rho)]'}{\rho} \hat{\mathbf{e}}_\phi. \quad (36)
 \end{aligned}$$

donde $\pi_m(\cos \theta) = \frac{1}{\sin \theta} P_m(\cos \theta)$, $\tau_m(\cos \theta) = \frac{dP_m(\cos \theta)}{d\theta}$ y las primas denotan derivadas con respecto a ρ .

Empleando los vectores armónicos, podemos expresar los campos esparcidos como

$$\mathbf{E}_{sc}(r, \theta, \phi) = E_0 \sum_{m=1}^{\infty} i^m \frac{(2m+1)}{m(m+1)} (ia_E(m) \mathbf{N}_{e1m} - a_M(m) \mathbf{M}_{o1m}), \quad (37)$$

$$\mathbf{H}_{sc}(r, \theta, \phi) = \frac{E_0}{Z_0} \sum_{m=1}^{\infty} i^m \frac{(2m+1)}{m(m+1)} (ia_M(m) \mathbf{N}_{o1m} + a_E(m) \mathbf{M}_{e1m}), \quad (38)$$

donde $Z_0 = c_0 \mu_0 = 377 \Omega$ es la impedancia del vacío. Los coeficientes de Mie $a_E(m)$ y $a_M(m)$ representan los coeficientes de la expansión que se determinan al imponer las

condiciones de frontera.

La serie de Mie representa a su vez una expansión multipolar del campo esparcido, en donde los multipolos eléctricos y magnéticos corresponden a los coeficientes $a_E(m)$ y $a_M(m)$, respectivamente (García-Etxarri *et al.*, 2011). Para una partícula esférica los coeficientes $\{a_E(1), a_M(1)\}$ corresponden a los dipolos eléctrico y magnético, los coeficientes $\{a_E(2), a_M(2)\}$ corresponden a los cuadrupolos eléctrico y magnético, y así sucesivamente.

En términos de las funciones de Ricatti-Bessel $\Psi_m(\rho) = \rho j_m(\rho)$ y $\Xi_m(\rho) = \rho h_m^{(1)}(\rho)$ los coeficientes de Mie para el caso de la esfera son

$$a_E(m) = \frac{n\Psi_m(nx)\Psi'_m(x) - \Psi_m(x)\Psi'_m(nx)}{n\Psi_m(nx)\Xi'_m(x) - \Xi_m(x)\Psi'_m(nx)}, \quad (39)$$

$$a_M(m) = \frac{\Psi_m(nx)\Psi'_m(x) - n\Psi_m(x)\Psi'_m(nx)}{\Psi(nx)\Xi'_m(x) - n\Xi_m(x)\Psi'_m(nx)}, \quad (40)$$

donde n es el índice de refracción de la partícula, $x = kR$ y R es el radio de la esfera.

3.2.1. El campo lejano

Suponiendo que el observador se encuentra muy lejos con respecto al origen ($kr \gg 1$), podemos emplear la llamada aproximación de campo lejano y hacer uso del hecho de que el campo es aproximadamente transversal ($\hat{\mathbf{e}}_r \cdot \mathbf{E}_{sc} \simeq 0$). Con esto, podemos recurrir a expresiones asintóticas del campo lejano y expresar el campo esparcido de la forma (Jackson, 2012; Johnson, 1996)

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) &= E_{sc\parallel}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{e}}_{\parallel} + E_{sc\perp}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\ &= E_{sc\theta}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{e}}_{\theta} - E_{sc\phi}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{e}}_{\phi}, \\ &= E_0 \frac{e^{ikr}}{-ikr} \mathcal{S}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (41)$$

donde $\hat{\mathbf{e}}_{\parallel} = \hat{\mathbf{e}}_{\theta}$ es paralelo y $\hat{\mathbf{e}}_{\perp} = -\hat{\mathbf{e}}_{\phi}$ es perpendicular al plano de esparcimiento y $\mathcal{S}(\theta, \phi) = S_{\theta}(\theta, \phi)\hat{\mathbf{e}}_{\theta} + S_{\phi}(\theta, \phi)\hat{\mathbf{e}}_{\phi}$ representa el vector de amplitud de esparcimiento.

De esta manera, las componentes del campo lejano son

$$E_{sc\theta}(r, \theta, \phi) \simeq E_0 \frac{e^{ikr}}{-ikr} S_\theta(\theta, \phi), \quad (42)$$

$$E_{sc\phi}(r, \theta, \phi) \simeq -E_0 \frac{e^{ikr}}{-ikr} S_\phi(\theta, \phi). \quad (43)$$

Con la expresión asintótica del campo esparcido podemos determinar el patrón angular de esparcimiento empleando la *sección transversal diferencial de esparcimiento* σ_d (área/ángulo). Para definir esta cantidad consideramos la sección transversal de esparcimiento C_{sc} (Ecuación 25), sustituyendo el diferencial de área en términos del ángulo sólido ($dS = r^2 d\Omega$) y empleando la expresión del campo lejano se obtiene

$$C_{sc} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sigma_d(\theta, \phi) d\Omega. \quad (44)$$

De esta manera la sección transversal diferencial de esparcimiento se define de la forma

$$\sigma_d(\theta, \phi) = \frac{1}{I_{inc}} \frac{dW_{sc}}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} |\mathcal{S}(\theta, \phi)|^2. \quad (45)$$

Para el caso específico de una partícula esférica, las amplitudes de esparcimiento se pueden expresar de la forma $S_\phi(\theta, \phi) = \sin \phi S_1(\cos \theta)$ y $S_\theta(\theta, \phi) = \cos \phi S_2(\cos \theta)$ (Bohren y Huffman, 2008), donde

$$S_1(\cos \theta) = \sum_m \frac{2m+1}{m(m+1)} (a_E(m)\pi_m(\cos \theta) + a_M(m)\tau_m(\cos \theta)), \quad (46)$$

$$S_2(\cos \theta) = \sum_m \frac{2m+1}{m(m+1)} (a_E(m)\tau_m(\cos \theta) + a_M(m)\pi_m(\cos \theta)). \quad (47)$$

Con esto, la sección transversal diferencial de esparcimiento para una partícula esférica es

$$\sigma_d(\theta, \phi) = \frac{1}{k^2} [|\cos \phi S_2(\cos \theta)|^2 + |\sin \phi S_1(\cos \theta)|^2]. \quad (48)$$

Otra cantidad que se emplea frecuentemente en estudios de radar para describir el patrón angular de esparcimiento, es la llamada *sección transversal radar de esparcimiento angular* (RCS por sus siglas en inglés de radar cross section). La RCS nos resultará muy útil para comparaciones numéricas, esta cantidad está definida como

(Balanis, 2012)

$$\sigma_{RCS}(\theta, \phi) = \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi r^2 \frac{|E_{sc}(\mathbf{r})|^2}{|E_0|^2} = \frac{4\pi}{k^2} |S(\theta, \phi)|^2, \quad (49)$$

A partir de la definición anterior, podemos destacar dos casos particulares de interés, esto es, cuando $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$. Con esto, podemos describir el patrón angular para un plano perpendicular al plano de esparcimiento ($\sigma_{sc}(\theta, \phi = 0) = \sigma_{sc}^\perp(\theta)$), y otro paralelo ($\sigma_{sc}(\theta, \phi = \pi/2) = \sigma_{sc}^\parallel$).

$$\sigma_{RCS}^\perp(\theta) = \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi r^2 \frac{|E_{sc}(\mathbf{r}_\perp)|^2}{|E_0|^2}, \quad (50)$$

$$\sigma_{RCS}^\parallel(\theta) = \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi r^2 \frac{|E_{sc}(\mathbf{r}_\parallel)|^2}{|E_0|^2}. \quad (51)$$

donde r_\parallel describe un arco de radio r paralelo al plano de la polarización incidente, y r_\perp describe un arco ortogonal a la polarización.

Podemos notar que las ecuaciones (45) y (49), para sección transversal diferencial σ_d y la de radar σ_{sc} sólo difieren de un factor de 4π . Sin embargo, las secciones transversales de radar usualmente aparecen en la literatura expresadas en decibeles (dB), esto es, $10 \log_{10}(\sigma_{sc})$. En general, ambas secciones transversales se definen en función de la amplitud de esparcimiento por lo que la elección de una u otra depende del área de estudio.

Para el caso específico de una partícula esférica, la sección transversal de radar (Ecuación (49)) toma la forma

$$\sigma_{RCS}(\theta, \phi) = \frac{4\pi}{k^2} |S(\theta, \phi)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} [|\cos \phi S_2(\cos \theta)|^2 + |\sin \phi S_1(\cos \theta)|^2]. \quad (52)$$

Mientras que las secciones perpendicular y paralela, respectivamente, son

$$\sigma_{RCS}^\parallel(\theta) = \frac{4\pi}{k^2} |S_2(\cos \theta)|^2, \quad (53)$$

$$\sigma_{RCS}^\perp(\theta) = \frac{4\pi}{k^2} |S_1(\cos \theta)|^2. \quad (54)$$

La sección transversal de esparcimiento C_{sc} , se puede obtener al integrar para todos los ángulos la sección transversal diferencial de esparcimiento (Ecuación 44).

Con ésto, se obtiene que

$$C_{sc} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) (|a_E(m)|^2 + |a_M(m)|^2). \quad (55)$$

Similarmente, la sección transversal de extinción es

$$C_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) \Re \{a_E(m) + a_M(m)\}. \quad (56)$$

Las eficiencias se obtienen al dividir las secciones transversales por la sección eficaz de la partícula G , que para el caso de una partícula esférica es un círculo de área $G = \pi R^2$, con esto¹

$$Q_{sc} = \frac{2}{x^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) (|a_E(m)|^2 + |a_M(m)|^2), \quad (57)$$

$$Q_{ext} = \frac{2}{x^2} \sum_{m=1}^{\infty} (2m+1) \Re \{a_E(m) + a_M(m)\}. \quad (58)$$

donde x es el parámetro de tamaño, que ya hemos definido como $x = kR$.

La eficiencia de esparcimiento puede presentar varios máximos que representan resonancias asociadas a la excitación de multipolos. Para ejemplificar la situación consideramos el esparcimiento producido por una esfera de Si de radio $R = 200$ nm, que es iluminada por una onda plana en el intervalo espectral de 800-2000 nm. En la figura 5, mostramos la eficiencia de esparcimiento total y por cada multipolo en esta región espectral ($Q_{sc}(a(m)) = \frac{2}{x^2} (2m+1) |a(m)|^2$). Observamos que la partícula presenta cuatro resonancias que corresponden a los dipolos magnético ($a_M(1)$ @1457 nm) y eléctrico ($a_E(1)$ @1108 nm), así como a los cuadrupolos magnético ($a_M(2)$ @1005 nm) y eléctrico ($a_E(2)$ @806 nm).

Para ilustrar esto, consideramos los patrones angulares a las longitudes de onda de las resonancias en la eficiencia de esparcimiento. En la figura 6, presentamos cálculos de sección transversal de radar para una longitud de onda de 806 nm, en la columna izquierda, que corresponde a la excitación del cuadrupolo eléctrico y en la

¹Para el caso específico de una partícula esférica se pueden obtener expresiones analíticas sin usar aproximaciones del campo lejano.

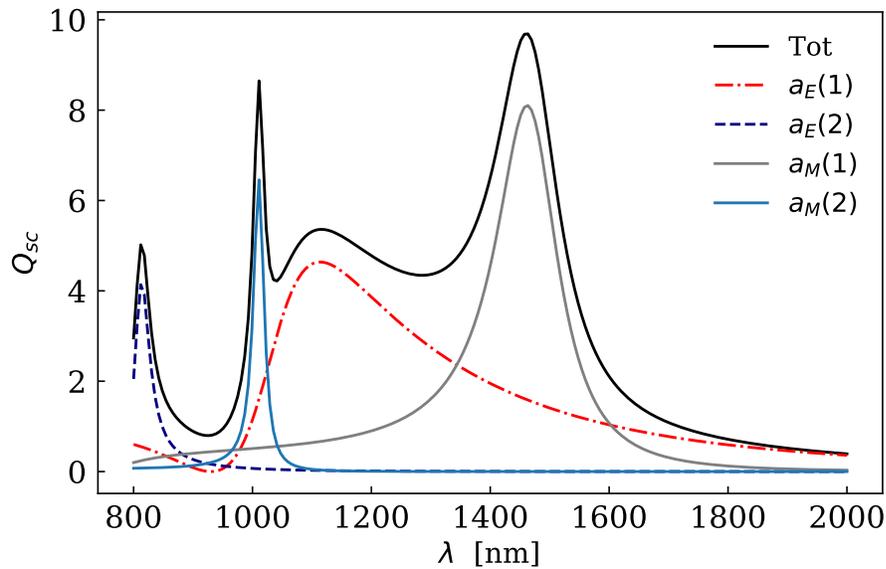


Figura 5. Eficiencia de esparcimiento total y por multipolo para una esfera de Si con radio $R = 200$ nm.

columna derecha, para $\lambda = 1005$ nm, que corresponde al cuadrupolo magnético. En el primer renglón presentamos las secciones transversales de radar (medio corte de la sección de radar paralela y perpendicular) en coordenadas cartesianas y en el segundo renglón en coordenadas polares. En el tercer renglón mostramos la distribución angular en 3D de la sección transversal de radar así como sus proyecciones que corresponden a las secciones de radar paralela y perpendicular. Podemos ver que ambas contribuciones tienen una estructura de cuatro lóbulos típica de los cuadrupolos. Sin embargo, mientras que para el cuadrupolo eléctrico observamos la estructura de cuatro lóbulos en un plano paralelo al de incidencia $x-z$ (σ_{RCS}^{\parallel}), para el cuadrupolo magnético la observamos en un plano perpendicular $y-z$ (σ_{RCS}^{\perp}).

Similarmente, en la figura 7 presentamos las excitaciones correspondientes al dipolo eléctrico (columna izquierda) y al dipolo magnético (columna derecha), a las longitudes de onda de 1108 y 1457 nm, respectivamente. Observamos en ambos casos, en el tercer renglón, un patrón angular de esparcimiento parecido al de un dipolo en coordenadas esféricas. De la misma manera que en el análisis de los cuadrupolos, en el plano paralelo ($x-z$) podemos ver la estructura de dos lóbulos para la excitación dipolar eléctrica, mientras que en el plano perpendicular ($y-z$) observamos la estructura de dos lóbulos del dipolo magnético.

La solución de Mie para partículas esféricas desarrollada en esta sección, nos permitirá validar los resultados numéricos que presentemos en tres dimensiones. De la

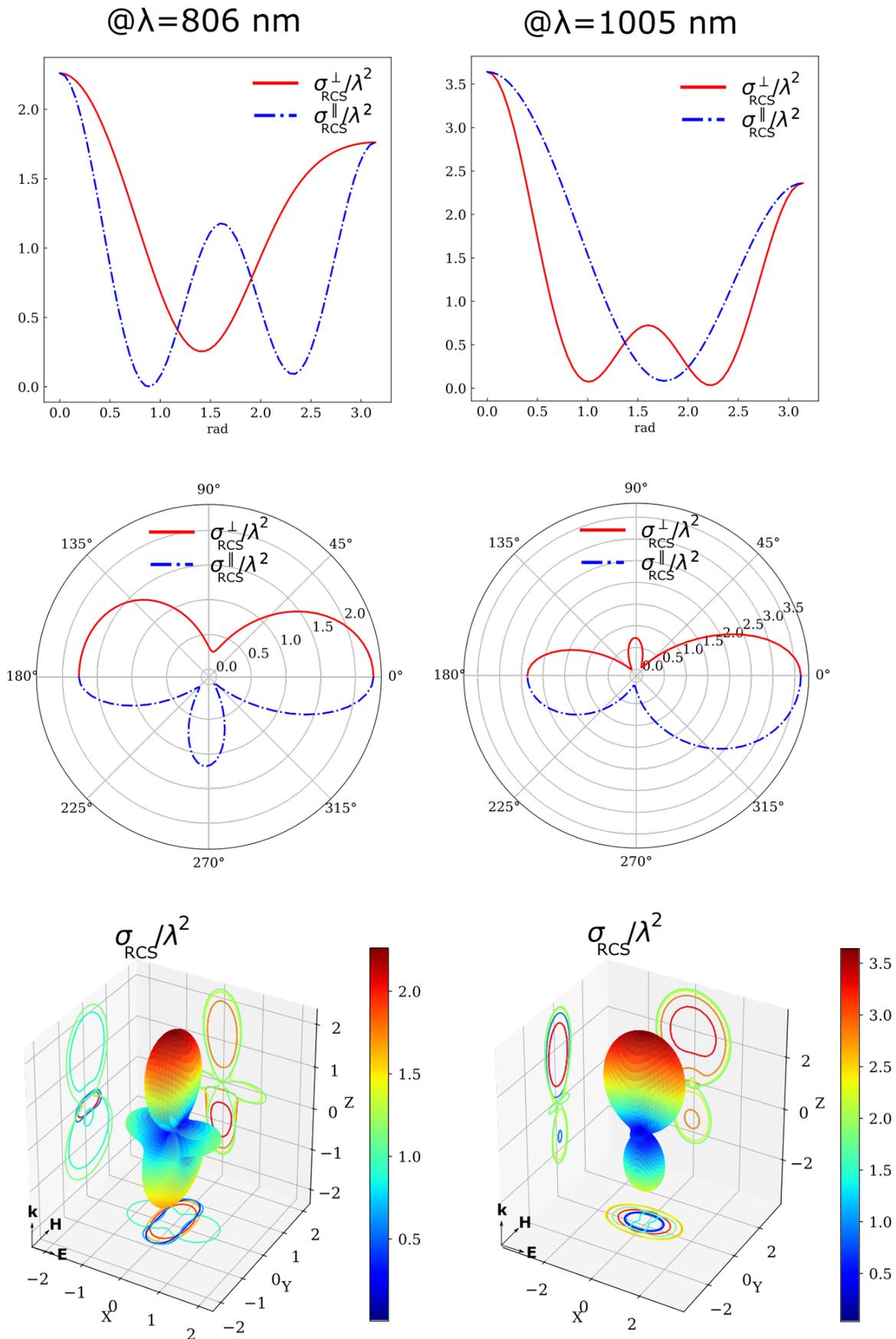


Figura 6. Cálculos de la sección transversal de radar a longitudes de onda de la resonancias para la esfera de la figura 5. En la columna izquierda para la excitación del cuadrupolo eléctrico (@806 nm) y en la columna derecha del cuadrupolo magnético (@1005 nm).

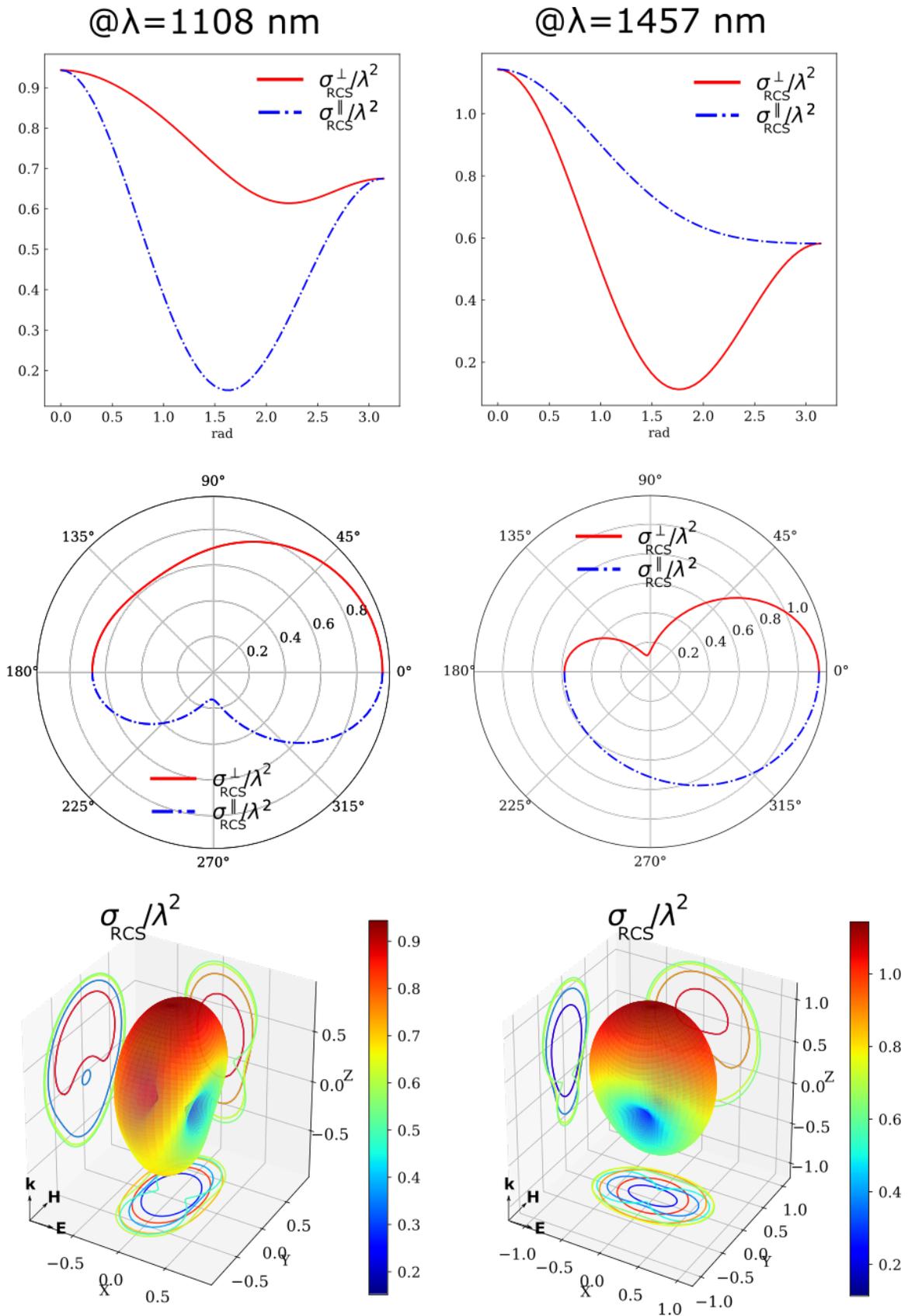


Figura 7. Cálculos de la sección transversal de radar a longitudes de onda de las resonancias para la esfera de la figura 5. En la columna izquierda para la excitación del dipolo eléctrico (@1108 nm) y en la columna derecha del dipolo magnético (@1457 nm).

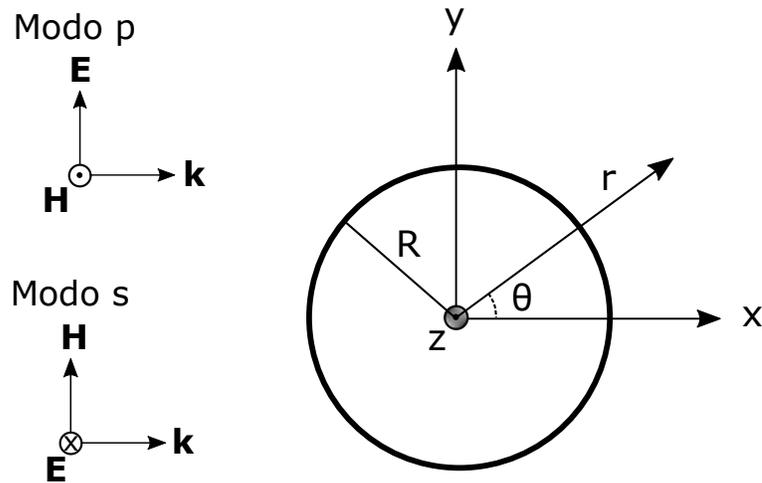


Figura 8. Situación física considerada, cilindro infinito de radio R es iluminado por una onda plana polarizada en p o s . El origen del sistema de coordenadas está en el centro de la partícula.

misma manera, la solución tipo Mie para el caso del cilindro infinito que presentamos a continuación, nos permitirá validar los resultados numéricos en dos dimensiones.

3.3. Esparcimiento EM por un cilindro infinito

Consideramos ahora el problema de esparcimiento electromagnético por un cilindro infinito iluminado por una onda plana (Figura 8). La solución de este problema se obtiene al resolver la ecuación (32) en coordenadas cilíndricas. Por simplicidad suponemos el caso de iluminación normal; es decir, que el ángulo entre el vector de propagación de la onda incidente y el eje del cilindro es de $\pi/2$. Esto reduce el problema de esparcimiento electromagnético a un problema bidimensional con una función generadora de la forma

$$\psi(\rho, \phi)_m \sim Z_m(\rho)e^{im\phi}, \quad (59)$$

donde $Z_m(\rho)$ representa la función de Bessel $J_m(\rho)$ para dentro del cilindro y la de Hankel $H_m^{(1)}(\rho)$ para la región externa.

Si proponemos que el vector \mathbf{c} sea el eje del cilindro $\hat{\mathbf{e}}_z$, los vectores armónicos son

$$\mathbf{M}_m(\rho, \phi) = k(im \frac{Z_m(\rho)}{\rho} \hat{\mathbf{e}}_r - Z'_m(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\phi) e^{im\phi}, \quad (60)$$

$$\mathbf{N}_m(\rho, \phi) = kZ_m(\rho) e^{im\phi} \hat{\mathbf{e}}_z. \quad (61)$$

Para el caso del cilindro infinito la solución depende del tipo de polarización del cam-

po incidente, representada por los casos en los que los campos eléctrico o magnético coinciden con el eje del cilindro $\hat{\mathbf{e}}_z$. A continuación usaremos la notación $\psi_{sc}(\rho, \phi)$ para denotar, el campo eléctrico $E_z(\rho, \phi)$ en polarización s y el campo magnético $H_z(\rho, \phi)$ en polarización p . Con lo anterior el campo esparcido en ambas polarizaciones puede escribirse como

$$\psi_{sc}^{\zeta}(\rho, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m^{\zeta} i^m H_m^{(1)}(\rho) e^{im\phi} \quad (62)$$

donde ζ representa la polarización s o p y los coeficientes de la expansión son

$$a_m^s = \frac{J_m(nx)J'_m(x) - nj'_m(nx)J_m(x)}{J_m(nx)H'_m(x) - nj'_m(nx)H_m(x)}, \quad (63)$$

$$a_m^p = \frac{nj'_m(x)J_m(nx) - nj_m(x)J'_m(nx)}{nj_m(nx)H'_m(x) - nj'_m(nx)H_m(x)}, \quad (64)$$

donde $x = kR$, R es el radio del cilindro y las primas denotan derivada con respecto a x .

De esta manera, se obtienen expresiones analíticas para las eficiencias en términos de los coeficientes de la expansión. La eficiencia de esparcimiento está dada por

$$Q_{sc}^{\zeta} = \int_0^{2\pi} q^{\zeta}(\theta) d\theta, \quad (65)$$

$$= \frac{2}{x} \left[|a_0^{\zeta}|^2 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} |a_m^{\zeta}|^2 \right], \quad (66)$$

donde $q^{\zeta}(\theta)$ representa el *coeficiente diferencial de la eficiencia esparcida por unidad de ángulo*², definido como

$$q^{\zeta}(\theta) = \frac{1}{\pi x} \left| a_0^{\zeta} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{\zeta} \cos m\theta \right|^2. \quad (67)$$

Similarmente, la extinción es

$$Q_{ext}^{\zeta} = \frac{2}{x} \Re \left\{ a_0^{\zeta} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{\zeta} \right\}. \quad (68)$$

²Básicamente, es el diferencial de sección transversal de esparcimiento dividido por la sección transversal geométrica de la partícula.

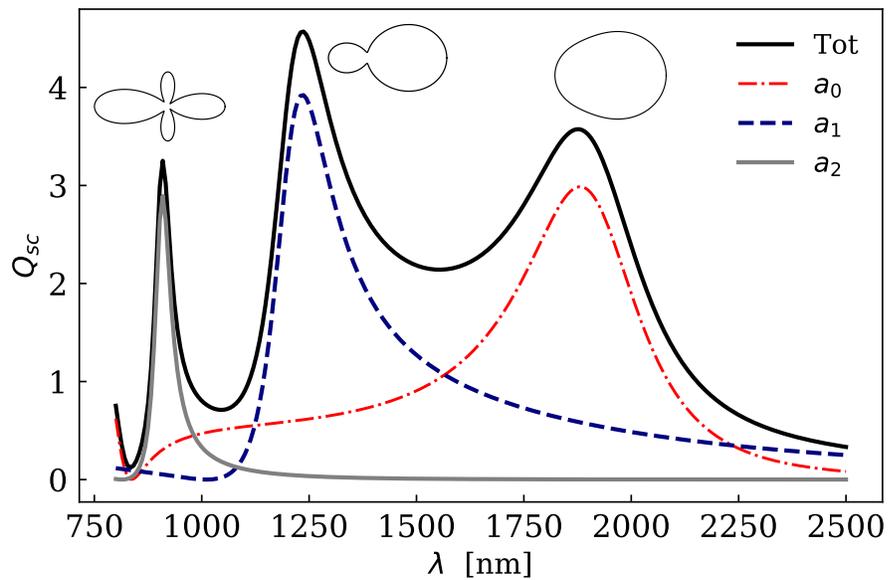


Figura 9. Eficiencia de esparcimiento para un cilindro infinito de Si con $R = 200$ nm en polarización p . a_0 corresponde al dipolo magnético, a_1 al dipolo eléctrico y a_2 al cuadrupolo eléctrico. Presentamos los patrones angulares de esparcimiento para los máximos de la eficiencia.

donde x es el parámetro de tamaño, que ya habíamos definido como $x = kR$.

Para ilustrar estos resultados y mostrar la presencia de resonancias en la partícula, consideramos un cilindro de Si de radio $R = 200$ nm, iluminado con luz con polarización p cuya longitud de onda está en el intervalo espectral de 800 a 2500 nm. En la figura 9, presentamos la eficiencia de esparcimiento total y la eficiencia de los primeros tres multipolos excitados. Para este caso la partícula soporta tres resonancias que corresponden a los primeros tres coeficientes de Mie $\{a_0^p @1872$ nm, $a_1^p @1230$ nm, $a_2^p @902$ nm}. Puede demostrarse que estos coeficientes corresponden a la excitación del dipolo magnético, dipolo eléctrico y cuadrupolo eléctrico (Petschulat *et al.*, 2010).

Es interesante notar de la eficiencia de esparcimiento, que los máximos de los multipolos no coinciden perfectamente con los máximos de la eficiencia, por lo que incluso en resonancia existe interferencia multipolar, como se observa en los patrones angulares de esparcimiento. Lo anterior, también puede observarse en los mapas de densidad de la figura 10. En ésta, presentamos los mapas de densidad del módulo del campo magnético (columna izquierda) y del campo eléctrico (columna derecha) a las longitudes de onda de los máximos de la eficiencia de esparcimiento.

Por otro lado, para el caso de iluminación con polarización s , puede mostrarse que el primer coeficiente a_0 corresponde al dipolo eléctrico y el segundo a_1 corresponde el

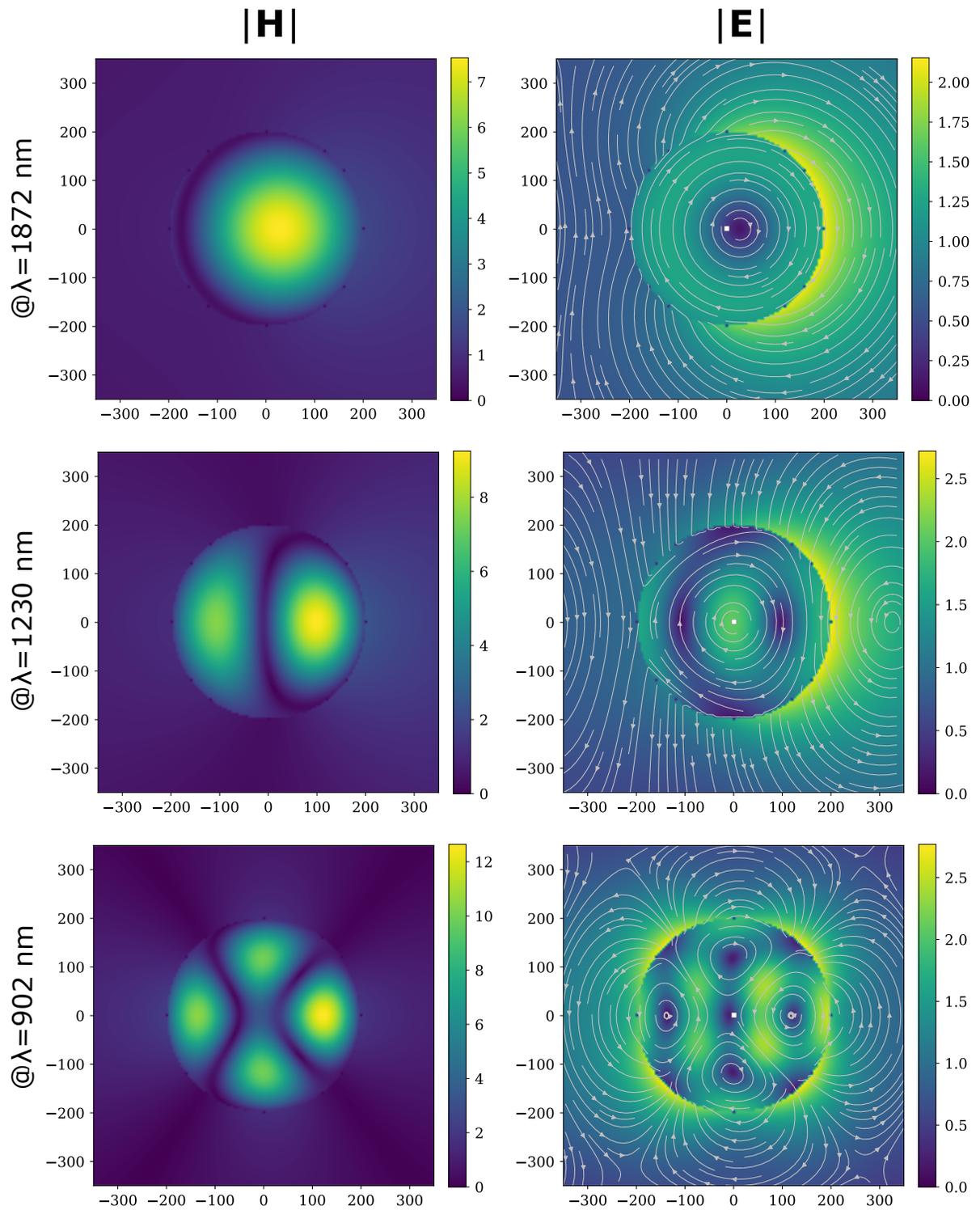


Figura 10. Mapas de falso color del modulo del campo magnético (columna izquierda) y del campo eléctrico (columna derecha), a las longitudes de onda de los máximos de la eficiencia de esparcimiento. Se observan las excitaciones multipolares 1872 nm (dipolo magnético), a 1230 nm (dipolo eléctrico) y a 902 nm (cuadrupolo eléctrico).

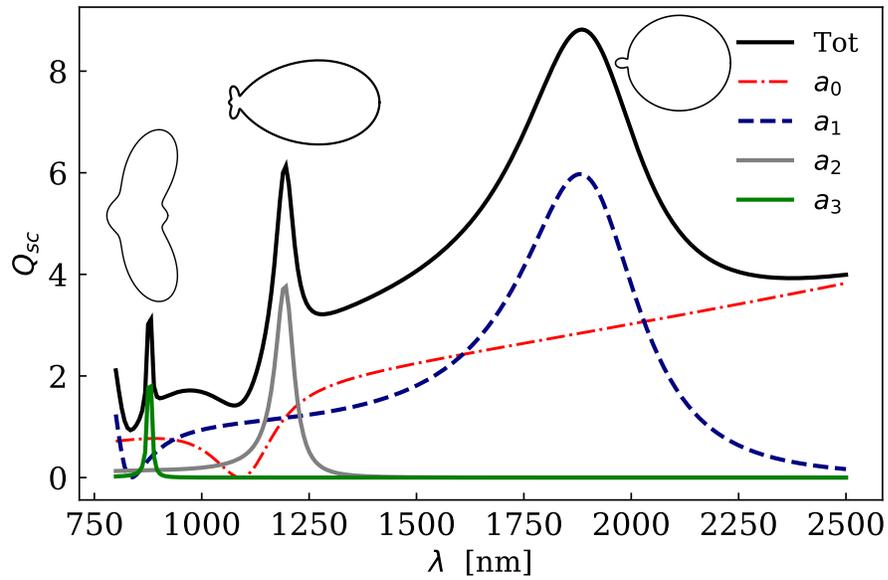


Figura 11. Eficiencia de esparcimiento para un cilindro infinito de Si con $R = 200$ nm en polarización s . En donde a_0 corresponde a la eficiencia del dipolo eléctrico y a_1 a la del dipolo magnético. Presentamos los patrones angulares de esparcimiento en los máximos de la eficiencia de esparcimiento.

dipolo magnético. En la figura 11 mostramos las eficiencias de esparcimiento total y por coeficiente, para el caso de iluminar con polarización s un cilindro de radio $R = 200$ nm de Si.

La teoría desarrollada en este capítulo nos servirá para validar los métodos computacionales que presentaremos en el siguiente capítulo. Asimismo, basados en los vectores armónicos estudiados en este capítulo, en el capítulo 5 desarrollamos un método para analizar el campo esparcido en términos de sus contribuciones multipolares.

Capítulo 4. Formulación en términos de ecuaciones integrales de superficie

Como mostramos en capítulos anteriores, para resolver el problema de esparcimiento es necesario resolver las ecuaciones (7) u (8) en las diferentes regiones en las que se tienen medios homogéneos. Sin embargo, estas ecuaciones sólo pueden resolverse analíticamente para un número limitado de sistemas físicos. Para un caso general es necesario recurrir a técnicas numéricas. Entre éstas, destacamos la formulación basada en la llamada *ecuación integral de superficie* (SIE, por sus siglas en inglés de surface integral equation). A diferencia de otros métodos, esta formulación permite calcular la respuesta óptica de geometrías muy complejas de medios homogéneos en términos de fuentes superficiales, lo que reduce enormemente el costo computacional. También permite evaluar de manera sencilla tanto el campo lejano como el campo cercano y se ha usado exitosamente en casos en los que el contraste de índices es alto, lo que constituye una limitación para otras técnicas numéricas como los métodos basados en integrales de volumen.

En este capítulo presentamos una derivación del método de la ecuación de superficie, basada en los trabajos de (Medgyesi-Mitschang *et al.*, 1994; Gibson, 2007; Kern y Martin, 2009). Discutimos algunos detalles técnicos de la implementación y comparamos los resultados con los casos de la solución analítica para la esfera y el cilindro infinito en medios dieléctricos. Centraremos la derivación en el caso de tres dimensiones, pues el caso de dos dimensiones se encuentra ampliamente documentado, ver, por ejemplo, (Valencia *et al.*, 2003; Giannini y Sánchez-Gil, 2007). En particular, para el caso 3D, en el apéndice F se describen más detalles para su uso e implementación.

4.1. Ecuaciones de Stratton-Chu en términos de las corrientes equivalentes

A continuación derivamos ecuaciones integrales que relacionan los campos en el espacio con las corrientes superficiales equivalentes. Para realizar esto, consideramos un problema de esparcimiento electromagnético en el que se tienen dos regiones que delimitan medios homogéneos, como se ilustra en la figura 12. La región R_1 está acotada por afuera por la superficie S_{inf} y por dentro por la superficie S . Esta superficie delimita a su vez la frontera de la región R_2 . Supondremos que todas las ondas elec-

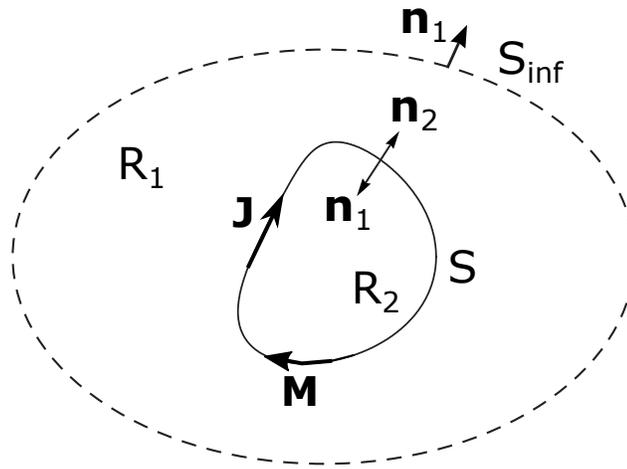


Figura 12. Bosquejo del problema equivalente.

tromagnéticas se originan de la región R_1 y que el resultado de ellas son los campos $\{\mathbf{E}_{inc}, \mathbf{H}_{inc}\}$.

Para cada región R_i , el campo eléctrico \mathbf{E}_i satisface la ecuación (7)

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) - k_i^2 \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = i\omega\mu\mathbf{j}(\mathbf{r}).$$

Adicionalmente, para cada región podemos definir un propagador de los campos vectoriales (Chen-To, 1994). Este propagador se conoce como la función de *Green diádica* $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ y obedece la ecuación

$$\nabla \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - k_i^2 \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{\mathbf{1}}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (69)$$

en donde $\bar{\mathbf{1}}$ es el tensor identidad y $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ es la función delta de Dirac. Para medios homogéneos la función de Green diádica está dada por

$$\bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left(\bar{\mathbf{1}} + \frac{\nabla\nabla}{k_i^2} \right) G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (70)$$

donde $(\nabla\nabla)_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j}$ y $G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{ik_i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ es la función de Green escalar 3D para la región R_i .

Si multiplicamos (7) por $\bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ y restamos (69) multiplicada por \mathbf{E}_i , obtenemos que

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \cdot \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \cdot \nabla \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\omega\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \mathbf{E}_i(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (71)$$

Podemos reescribir el lado izquierdo de la ecuación (71) usando las identidades

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \bar{\mathbf{c}} = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \bar{\mathbf{c}}), \quad (72)$$

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \bar{\mathbf{c}}) = -\mathbf{b} \cdot (\mathbf{a} \times \bar{\mathbf{c}}). \quad (73)$$

Con $\mathbf{a} = \nabla$, $\mathbf{b} = \nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r})$ y $\bar{\mathbf{c}} = \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en (72), escribimos el primer término de la forma

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \cdot \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')).$$

Similarmente, con $\mathbf{a} = \mathbf{E}_i(\mathbf{r})$, $\mathbf{b} = \nabla$ y $\bar{\mathbf{c}} = \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en (73), el segundo término es

$$-\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \cdot \nabla \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \nabla \cdot (\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')).$$

Sustituyendo ambos términos en (71) e integrando sobre el volumen para cada región encontramos

$$\int_{R_i} \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) dV = \int_{R_i} [i\omega \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] dV, \quad (74)$$

con $\mathbf{r}' \in R_i$.

Aplicando el teorema de la divergencia del lado izquierdo de (74) y denotando por δR_i la frontera de la región R_i obtenemos que

$$\int_{\delta R_i} \hat{\mathbf{n}}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) ds = \int_{R_i} i\omega \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV - \theta(\mathbf{r}') \mathbf{E}_i(\mathbf{r}'), \quad (75)$$

$$\text{donde } \theta(\mathbf{r}') = \begin{cases} 1, & \text{si } \mathbf{r}' \in R_i, \\ 0, & \text{si } \mathbf{r}' \notin R_i. \end{cases}$$

Podemos transformar el primer término de la integral del lado derecho de (75) usando la identidad $\mathbf{a} \cdot \bar{\mathbf{A}}^T = \bar{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{a}$ y el principio de reciprocidad $(\bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))^T = \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ obteniendo que

$$i\omega \mu_i \int_{R_i} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV = i\omega \mu_i \int_{R_i} \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) dV = \mathbf{E}_i^{inc}(\mathbf{r}'), \quad (76)$$

de esta ecuación podemos identificar el campo eléctrico incidente producido por la densidad de corriente en la región R_i . En particular, para nuestro análisis supusimos

que las fuentes vienen de la región R_1 , por lo que el campo incidente en la región R_2 es cero.

Sustituyendo (76) en (75) obtenemos que

$$\int_{\delta R_i} \hat{\mathbf{n}}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) ds = \mathbf{E}_i^{inc}(\mathbf{r}') - \theta(\mathbf{r}') \mathbf{E}_i(\mathbf{r}'). \quad (77)$$

Considerando las fronteras de la figura 12, observamos que $\delta R_2 = S$ y que la frontera $\delta R_1 = S_{inf} \cup (-S)$. Si aplicamos la condición de radiación, podemos concluir que cuando la superficie $S_{inf} \rightarrow \infty$ la integral de S_{inf} debe tender a cero, por lo que ambas fronteras en la ecuación (77) se reducen a la superficie S pero con normales de signo contrario.

Para simplificar el lado izquierdo de (77), en el primer término del integrando empleamos la identidad (72) y la ley de Faraday $\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H}$ como

$$\hat{\mathbf{n}}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) = i\omega\mu_i \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \cdot [\hat{\mathbf{n}}_i \times \mathbf{H}_i(\mathbf{r})],$$

en donde nuevamente se empleó el principio de reciprocidad para la función de Green diádica. Similarmente, para el segundo término usando la identidad (73) obtenemos

$$\hat{\mathbf{n}}_i \cdot (\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \times \nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) = -[\nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}', \mathbf{r})] \cdot [\hat{\mathbf{n}}_i \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r})],$$

en donde también por reciprocidad consideramos que se debe cumplir que $(\nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))^T = -(\nabla \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}', \mathbf{r}))$.

Sustituyendo los términos anteriores en la ecuación (77), e intercambiado \mathbf{r} y \mathbf{r}' obtenemos

$$\int_S i\omega\mu_i \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot [\hat{\mathbf{n}}_i \times \mathbf{H}_i(\mathbf{r}')] dS' - \int_S [\nabla' \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot [\hat{\mathbf{n}}_i \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}')] dS' = \mathbf{E}_i^{inc}(\mathbf{r}) - \theta_i(\mathbf{r}) \mathbf{E}_i(\mathbf{r}). \quad (78)$$

Empleando el principio de equivalencia superficial (sección 2.2.2), podemos reescribir la ecuación (78) en términos de las corrientes equivalentes eléctricas $\mathbf{J}_i = \hat{\mathbf{n}}_i \times \mathbf{H}_i$

y magnéticas $\mathbf{M}_i = -\hat{\mathbf{n}}_i \times \mathbf{E}_i$, con lo que obtenemos que

$$\int_S i\omega\mu_i \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{J}_i(\mathbf{r}') dS' + \int_S [\nabla' \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{M}_i(\mathbf{r}') dS' = \mathbf{E}_i^{inc}(\mathbf{r}) - \theta_i(\mathbf{r})\mathbf{E}_i(\mathbf{r}), \quad (79)$$

Similarmente, si hubiéramos partido de la ecuación (8), obtendríamos una ecuación integral para el campo magnético en función de las corrientes equivalentes de la forma

$$\int_S i\omega\epsilon_i \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{M}_i(\mathbf{r}') dS' - \int_S [\nabla' \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{J}_i(\mathbf{r}') dS' = \mathbf{H}_i^{inc}(\mathbf{r}) - \theta_i(\mathbf{r})\mathbf{H}_i(\mathbf{r}). \quad (80)$$

Las ecuaciones (79) y (80) pueden simplificarse empleando la relación de las corrientes equivalentes internas y externas $\mathbf{J} = -\mathbf{J}_1 = \mathbf{J}_2$ y $\mathbf{M} = -\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_2$ (subsección 2.2.2), y definiendo los siguientes operadores lineales integrodiferenciales como¹

$$\widehat{D}^i \mathbf{X}(\mathbf{r}) = \int_S \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{X}(\mathbf{r}') dS', \quad (81)$$

$$\widehat{K}^i \mathbf{X}(\mathbf{r}) = \int_S [\nabla' \times \bar{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{X}(\mathbf{r}') dS'. \quad (82)$$

Con lo anterior, podemos expresar los campos de la forma

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) \\ \mathbf{H}_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_i^{inc}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{H}_i^{inc}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} i\omega\mu_i \widehat{D}^i & \widehat{K}^i \\ -\widehat{K}^i & i\omega\epsilon_i \widehat{D}^i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}(\mathbf{r}') \\ \mathbf{M}(\mathbf{r}') \end{bmatrix}, \quad (83)$$

donde $\mathbf{r} \in R^i$ y los signos \pm corresponden a las regiones R_1 y R_2 , respectivamente.

Las relaciones para los campos mostrados en la ecuación (83), son las llamadas ecuaciones de Stratton-Chu expresadas en términos de las corrientes equivalentes. Para utilizar estas ecuaciones en un problema de esparcimiento electromagnético, es necesario determinar las corrientes equivalentes $\{\mathbf{J}, \mathbf{M}\}$ en función del campo incidente. Para realizar esto, a continuación separaremos el problema por regiones y proyectaremos el campo en la superficie S .

¹Nótese que las integrales son sobre las fuentes y al aplicar el operador devuelve algo evaluado en el punto de observación. Quizás sería más correcto emplear la notación $(\widehat{D}^i \mathbf{X})(\mathbf{r})$ ó $(\widehat{D}^i \mathbf{X}(\mathbf{r}))(\mathbf{r})$, pero usamos la notación *usual* que aparece en la literatura.

4.2. Formulación integral PMCHW

Si empleamos la ecuación (83) para la región R_1 y R_2 , y restamos las ecuaciones para los campos obtenemos

$$\theta_1(\mathbf{r})\mathbf{E}_1(\mathbf{r}) - \theta_2(\mathbf{r})\mathbf{E}_2(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{inc}(\mathbf{r}) + (i\omega\mu_1\widehat{D}^1 + i\omega\mu_2\widehat{D}^2)\mathbf{J}(\mathbf{r}) + (\widehat{K}^1 + \widehat{K}^2)\mathbf{M}(\mathbf{r}), \quad (84)$$

$$\theta_1(\mathbf{r})\mathbf{H}_1(\mathbf{r}) - \theta_2(\mathbf{r})\mathbf{H}_2(\mathbf{r}) = \mathbf{H}^{inc}(\mathbf{r}) - (\widehat{K}^1 + \widehat{K}^2)\mathbf{J}(\mathbf{r}) + (i\omega\epsilon_1\widehat{D}^1 + i\omega\epsilon_2\widehat{D}^2)\mathbf{M}(\mathbf{r}), \quad (85)$$

donde empleamos el hecho de que los campos incidentes vienen de la región R_1 . Para el caso que existan fuentes en la región R_2 , éstos se pueden agregar en las ecuaciones como campos incidentes.

Si multiplicamos la ecuación (84) por $\hat{\mathbf{n}} \times$, aplicamos el límite cuando $\mathbf{r} \rightarrow S$ y empleamos la condición de frontera (9), obtenemos una ecuación para los componentes tangenciales de la forma²

$$\left[(i\omega\mu_1\widehat{D}^1 + i\omega\mu_2\widehat{D}^2)\mathbf{J}(\mathbf{r}) + (\widehat{K}^1 + \widehat{K}^2)\mathbf{M}(\mathbf{r}) \right]_{\parallel} = -[\mathbf{E}^{inc}]_{\parallel}, \quad (86)$$

donde se empleó la identidad $\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A} = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A})\hat{\mathbf{n}} - \mathbf{A} = -\mathbf{A}_{\parallel}$, y el subíndice \parallel indica que se debe tomar la parte paralela.

Similarmente para la ecuación (85) obtenemos

$$\left[-(\widehat{K}^1 + \widehat{K}^2)\mathbf{J}(\mathbf{r}) + (i\omega\epsilon_1\widehat{D}^1 + i\omega\epsilon_2\widehat{D}^2)\mathbf{M}(\mathbf{r}) \right]_{\parallel} = -[\mathbf{H}^{inc}]_{\parallel}, \quad (87)$$

Las ecuaciones (86) y (87) constituyen un sistema acoplado con las corrientes como incógnitas, que puede expresarse como

$$\begin{bmatrix} (i\omega\mu_1\widehat{D}^1 + i\omega\mu_2\widehat{D}^2) & (\widehat{K}^1 + \widehat{K}^2) \\ -(\widehat{K}^1 + \widehat{K}^2) & (i\omega\epsilon_1\widehat{D}^1 + i\omega\epsilon_2\widehat{D}^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J} \\ \mathbf{M} \end{bmatrix}_{\parallel} = - \begin{bmatrix} \mathbf{E}^{inc} \\ \mathbf{H}^{inc} \end{bmatrix}_{\parallel}, \quad (88)$$

esta es la formulación PMCHW para una frontera dieléctrica, nombrada por los autores del trabajo Poggio, Miller, Chang, Harrinton y Wu (Mautz y Harrington, 1977).

²Existen dos formas de proceder que llevan a formulaciones para las componentes tangenciales o normales. En este trabajo nos enfocamos sólo en la formulación tangencial.

Esta formulación describe totalmente al sistema, pero en general no es posible resolver de manera exacta, por lo que es necesario recurrir a técnicas numéricas. Un método estándar es aproximar las corrientes equivalentes con el llamado método de momentos (MoM, por sus siglas en inglés de method of moments) (Harrington, 1993). Esta técnica permite convertir ecuaciones integrales en sistemas lineales que pueden resolverse numéricamente.

El primer paso para emplear este método es aproximar la superficie S en términos de un mallado discreto. La geometría más común para realizar esto, es emplear una discretización o mallado en triángulos, como veremos a continuación.

4.3. Discretización de las corrientes equivalentes

Para poder resolver por el MoM es necesario aproximar las corrientes superficiales en términos de unas funciones base

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \alpha_n \mathbf{f}_n(\mathbf{r}), \quad (89)$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \beta_n \mathbf{f}_n(\mathbf{r}). \quad (90)$$

Las funciones base más comunes para un mallado triangular fueron definidas por Rao, Walton y Glison (RWG) (Rao *et al.*, 1982). Estas funciones se definen para una pareja de triángulos T_n^+ y T_n^- que comparten un lado L_n como

$$\mathbf{f}_n(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{\pm L_n}{2A_n^\pm} (\mathbf{r} - \mathbf{p}_n^\pm) : & \mathbf{r} \in T_n^\pm, \\ 0 : & \text{para otro caso,} \end{cases}$$

donde A_n^\pm denota el área y \mathbf{p}_n^\pm el vértice libre del triángulo en cualquier lado (Figura 13).

Empleando las funciones RWG en las ecuaciones (89) y (90), N representa el número total de lados o de parejas. En particular, para un mallado cerrado y sin juntas T , las parejas cumplen con $N = \frac{3}{2}N_T$, donde N_T el número total de triángulos (Wah, 1999).

Una vez que hemos definido una base en el MoM y discretizado la superficie, el

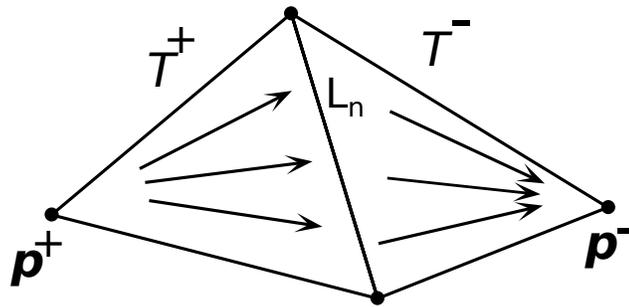


Figura 13. Funciones base RWG definidas para una pareja de lados que comparten un lado L_n .

siguiente paso es proyectar las ecuaciones (88) en otras funciones base o funciones de prueba. En particular, empleamos la formulación dada por Garlekin del MoM, en la que se usan como funciones de prueba las mismas funciones base (Apéndice A). Lo que transforma los operadores integrales \widehat{D}^i y \widehat{K}^i en los operadores matriciales denotados por $\widehat{\mathcal{D}}^i$ y $\widehat{\mathcal{K}}^i$.

Realizando lo anterior, transformamos el sistema de ecuaciones acopladas (88) al sistema matricial de $2N \times 2N$ dado por

$$\begin{bmatrix} (i\omega\mu_1\widehat{\mathcal{D}}^1 + i\omega\mu_2\widehat{\mathcal{D}}^2) & (\widehat{\mathcal{K}}^1 + \widehat{\mathcal{K}}^2) \\ -(\widehat{\mathcal{K}}^1 + \widehat{\mathcal{K}}^2) & (i\omega\epsilon_1\widehat{\mathcal{D}}^1 + i\omega\epsilon_2\widehat{\mathcal{D}}^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J} \\ \mathbf{M} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathcal{E} \\ \mathcal{H} \end{bmatrix}, \quad (91)$$

donde las submatrices $\widehat{\mathcal{D}}^i$ y $\widehat{\mathcal{K}}^i$ están definidas por

$$\mathcal{D}_{mn}^i = \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS' dS, \quad (92)$$

$$\mathcal{K}_{mn}^i = \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} [\nabla' \times \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS' dS, \quad (93)$$

$$\mathcal{E} = \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}^{inc}(\mathbf{r}) dS, \quad (94)$$

$$\mathcal{H} = \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}^{inc}(\mathbf{r}) dS, \quad (95)$$

$$[\mathbf{J} \ \mathbf{M}]^T = [\alpha_1, \dots, \alpha_N, \beta_1, \dots, \beta_N]^T, \quad (96)$$

donde se empleó el hecho que las integrales sobre S se reducen a la m -ésima pareja, es decir, $S_m = T_m^+ \cup T_m^-$. Esto es debido a que las funciones $\mathbf{f}_m(\mathbf{r})$ valen cero para $\mathbf{r} \notin T_m^\pm$.

Podemos observar de las ecuaciones (92)-(95), que las únicas componentes que

sobreviven de las integrales son las tangenciales, ya que estamos realizando una proyección sobre las funciones RWG que son paralelas a la superficie S_m .

La ecuación (91) puede generalizarse para cualquier número de regiones simplemente al aplicar la suma de las submatrices y de fuentes para cada región R_i .

4.4. Evaluación de la función de Green y tratamiento especial de los puntos singulares

Para evaluar los elementos de matriz (92) y (93) en medios homogéneos, es conveniente reformular las ecuaciones en términos de la función de Green escalar (70). Con esto podemos reescribir los elementos \mathcal{D}_{mn}^i en términos de la función de Green (Apéndice C)

$$\mathcal{D}_{mn}^i = \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS' - \frac{1}{k_i^2} \int_{S_m} \nabla \cdot \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \int_{S_n} G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS', \quad (97)$$

mientras que los elementos \mathcal{K}_{mn}^i son³

$$\mathcal{K}_{mn}^i = \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} \nabla' G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \times \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS'. \quad (98)$$

La mayoría de los elementos en (91) pueden calcularse con las ecuaciones (97) y (98) aplicando cuadratura gaussiana (Apéndice B). Esto es, excepto en los puntos singulares de la función de Green y su gradiente (es decir cuando $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = R \rightarrow 0$). Lo anterior ocurre para parejas de triángulos muy cercanos o cuando la pareja del punto de observación y el punto fuente comparten un lado o se superponen.

En los casos anteriormente mencionados se necesita usar un tratamiento especial para los puntos singulares (Villa, 2007). El problema anterior puede mitigarse usando varios esquemas de substracción de la singularidad. Esto se logra al separar las

³Para estos elementos puede demostrarse que cuando el triángulo de observación y el de referencia son el mismo la integral vale cero, ecuación (A10) de la referencia (Medgyesi-Mitschang *et al.*, 1994). Recomendamos ponerlo como condición en el programa numérico.

integrales fuente (sobre \mathbf{r}') en una parte suave y otra singular (Kern y Martin, 2009):

$$G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \underbrace{\left(\frac{e^{ik_i R} - 1}{4\pi R} + \frac{k_i^2 R}{8\pi} \right)}_{G_i^{Suave}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} + \underbrace{\left(\frac{1}{4\pi R} - \frac{k_i^2 R}{8\pi} \right)}_{G_i^{Singular}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}. \quad (99)$$

El primer término de $G_i^{Singular}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ es singular cuando $R \rightarrow 0$, mientras que el segundo, es singular cuando se toma el gradiente. Esta función singular debe integrarse de manera analítica (Hanninen *et al.*, 2006), mientras que la parte suave $G_i^{Suave}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ puede integrarse por cuadratura gaussiana.

4.5. Cálculo de la eficiencia de esparcimiento

Una vez que se tienen las corrientes eléctricas y magnéticas, podemos obtener los campos esparcidos con la ecuación (83) y calcular la potencia esparcida empleando la ecuación (25)

$$W_{sc} = \frac{1}{2} \int_A \Re \{ \mathbf{E}_{sca}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{sca}^*(\mathbf{r}) \} \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) dS.$$

Esta ecuación puede simplificarse si consideramos la superficie virtual A como una esfera de un radio mucho mayor que el tamaño de la partícula, y así usar las relaciones entre los campos eléctrico y magnético en el campo lejano como

$$\mathbf{H}_{sca}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2Z_0} \hat{\mathbf{e}}_r \times \mathbf{E}_{sca}(\mathbf{r}). \quad (100)$$

Con esto, reescribimos la potencia esparcida como

$$W_{sc} = \frac{1}{2Z_0} \int_A |\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r})|^2 dS, \quad (101)$$

con lo que al dividir entre la sección transversal de la partícula (G), la eficiencia de esparcimiento es simplemente

$$Q_{sc} = \frac{1}{2Z_0 I_{inc} G} \int_A |\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r})|^2 dS. \quad (102)$$

Para ondas planas la irradiancia incidente es $I_{inc} = \frac{n}{2Z_0} |E_{inc}|^2$, donde n es el índice de refracción del medio externo.

Una manera simple de implementar (102), es usar como la superficie de integración el mallado triangular de una esfera y calcular la eficiencia evaluando en cada punto medio de los triángulos como

$$Q_{sc} \sim \frac{1}{2Z_0 I_{inc} G} \sum_{n=1}^N A_n |\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}_n)|^2, \quad (103)$$

donde \mathbf{r}_n es el punto medio y A_n el área del triángulo n-ésimo.

La ecuación (103) es equivalente a integrar usando cuadratura gaussiana de punto medio, si se requiere una mejor aproximación, se pueden recurrir a cuadraturas gaussianas de mayor orden.

4.6. Validación de los resultados numéricos

Para validar nuestra implementación de la formulación del SIE, a continuación presentamos comparaciones con la solución analítica del problema de esparcimiento electromagnético por una partícula esférica. Asimismo, realizamos comparaciones para otro tipo de partículas con otra implementación numérica del SIE representada por el software de dominio público *scuff-EM* (Reid y Johnson, 2015)⁴. En particular, realizamos la generación del mallado de la partícula usado en nuestro código, con el software libre *Netgen* en formato *Surface mesh format* (Schöberl, 1997). Mientras que el mallado empleado para las simulaciones hechas con el *Scuff-EM* se realizaron con el software privado *COMSOL* en formato STL (Pryor, 2009), y posteriormente transformado al formato *msh* con el software libre *Gmsh* (Geuzaine y Remacle, 2009).

En los siguientes ejemplos, suponemos que la onda incidente es una onda plana propagándose en el vacío a lo largo del eje z y que el campo eléctrico oscila en el eje x . Para el mallado de la superficie de la partícula usamos 620 triángulos (Figura 14). En el cálculo de las corrientes superficiales y el campo eléctrico, empleamos cuadratura gaussiana de tres puntos, y en el cálculo de la eficiencia esparcida utilizamos cuadratura del punto medio.

Primero consideramos las secciones transversales radar, paralela (x - z) y perpendicular (y - z) a la polarización de la luz incidente, para un problema de esparcimiento

⁴<http://github.com/homerreid/scuff-EM>

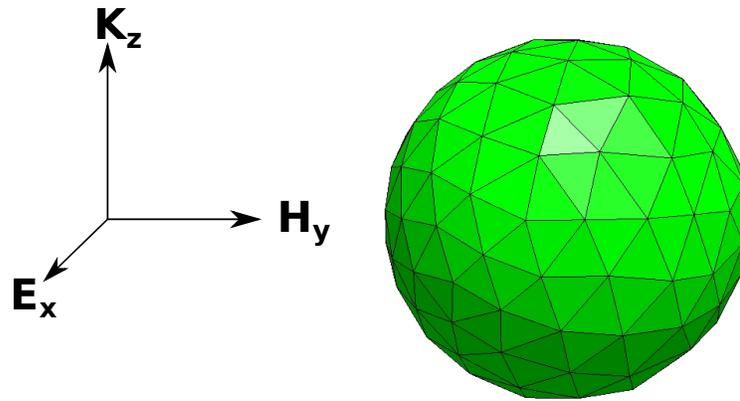


Figura 14. Bosquejo de iluminación y del mallado triangular de la superficie de la esfera.

en el que el parámetro de tamaño es $x = \frac{2\pi R}{\lambda} = \pi$, con $\lambda = 2$ y radio $R = 1$. En la figura 15-a), presentamos una comparación entre los resultados numéricos y analíticos para una partícula con una función dieléctrica $\epsilon = 4$. Observamos que para el plano paralelo, mostrado de 180° a 360° , el cálculo numérico (línea continua azul) coincide muy bien con el resultado analítico (línea discontinua verde). Similarmente, para el plano transversal mostrado de 0° a 180° , los resultados numérico (línea continua roja) y analítico (línea discontinua negra) coinciden bien excepto para pequeñas diferencias en los mínimos. Si ahora consideramos los mismos parámetros pero para un medio de alto índice refracción, como lo es $\epsilon = 16$ (Figura 15-b)). Obtenemos que también la solución analítica y numérica coinciden, salvo diferencias más notorias en los mínimos de esparcimiento. En general, podemos decir que ambos ejemplos reproducen el mismo comportamiento del patrón angular de la radiación.

Una comparación interesante entre nuestro código y otra implementación del SIE representada por el software Scuff-em se presenta en la figura 16. Para este caso consideramos el mismo dieléctrico de alto de índice $\epsilon = 16$ pero variamos la longitud de onda $\lambda = 1$ y el radio de la partícula $R = 0.5$. Del lado izquierdo de la figura presentamos la sección transversal perpendicular y del lado derecho la paralela. En ambos casos presentamos los resultados dados por la solución de Mie. Observamos que los resultados analíticos y los numéricos entre ambas implementaciones son similares excepto en los mínimos de radiación. En general, ambos métodos numéricos concuerdan con la solución de Mie.

En la figura 17, mostramos la eficiencia de esparcimiento para una esfera de Si con $R = 200$ nm en un rango espectral de 800 a 2000 nm calculado con la solución de Mie,

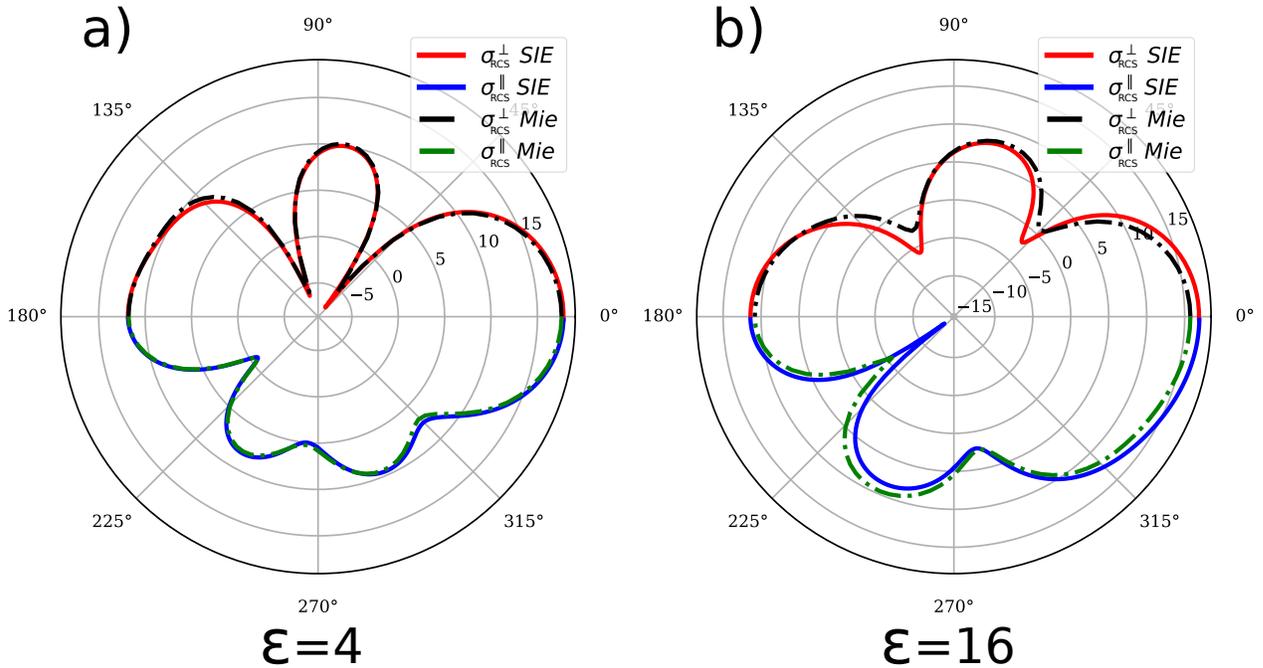


Figura 15. Comparación entre el SIE y la solución de Mie para la sección transversal de radar para un plano paralelo y perpendicular en dB , con un parámetro de tamaño de $x = \pi$, $\lambda = 2$ y $R = 0.5$, para un dieléctrico de $\epsilon = 4$ de lado izquierdo y un dieléctrico de $\epsilon = 16$ del lado derecho.

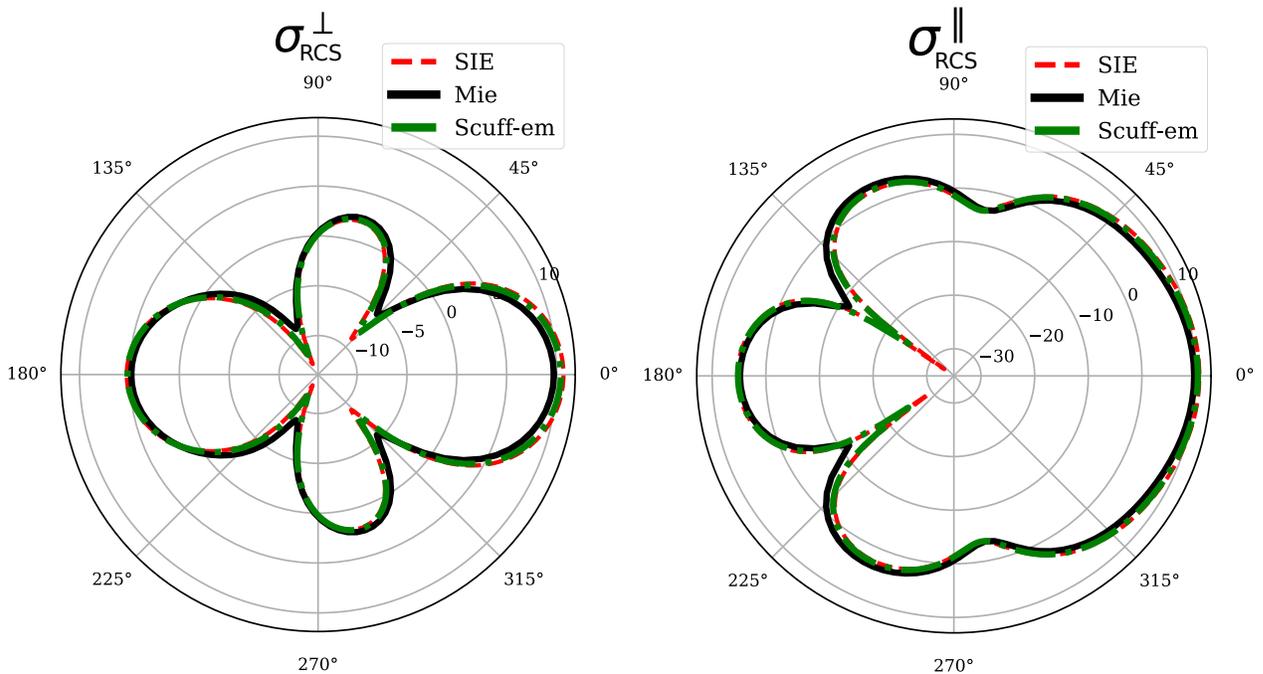


Figura 16. Comparación para la sección transversal de radar del plano perpendicular (paralelo) del lado derecho (izquierda) en dB , entre el SIE (línea discontinua roja), el código scuff-em (línea discontinua verde) y la solución tipo Mie (línea continua negra) con un parámetro de tamaño de $x = \pi$, $\lambda = 1$, $R = 1.0$, y $\epsilon = 16$.

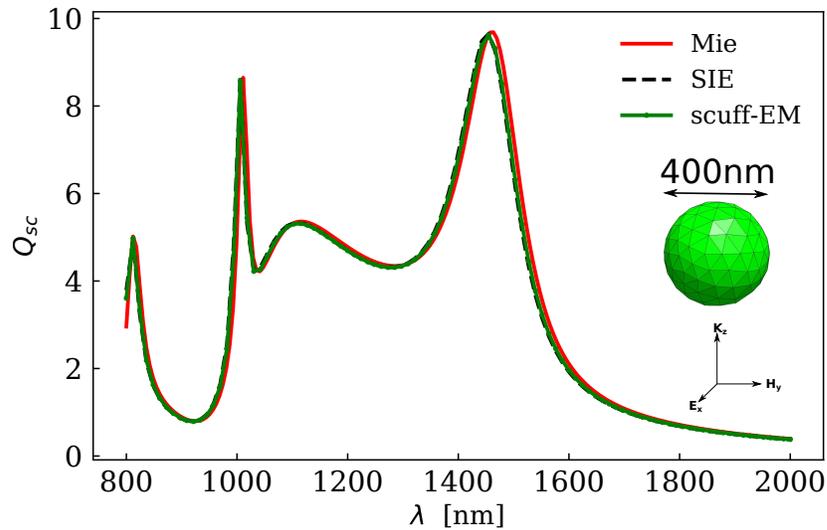


Figura 17. Comparación de la eficiencia esparcida para una esfera de Si de radio 200 nm, entre el SIE (línea discontinua negra), el código scuff-em (línea continua con puntos verde) y la solución tipo Mie (línea continua roja).

con el Scuff-em y con nuestra implementación. Observamos que los resultados entre ambas implementaciones del MoM son muy parecidos y que éstos concuerdan con la solución analítica.

Consideramos ahora una geometría más compleja, como lo es un cubo de Si de 400 nm de lado. En la figura 18, presentamos la eficiencia de esparcimiento calculada con los dos métodos numéricos. Aunque el acuerdo es bueno, podemos apreciar que existen pequeñas diferencias entre los dos métodos; una especie de desplazamiento en λ entre ambos resultados. Estas diferencias pueden deberse a que usamos una cuadratura gaussiana de tres puntos, mientras que el programa scuff-em usa cuadraturas de orden mayor. También, puede deberse a que usamos un mallado diferente para los dos programas; en el programa Scuff-em se empleó un mallado de 720 triángulos y en nuestro código sólo 560. La diferencia de la discretización en triángulos se debe a que los programas aceptan como entrada distintos formatos de malla lo que dificultó la generación de mallas iguales para la misma partícula.

Además del SIE, en este trabajo desarrollamos un código basado en el método integral para partículas con simetría en una dirección o 2D. Los detalles sobre esta formulación en dos dimensiones pueden consultarse en las referencias (Valencia *et al.*, 2003; Giannini y Sánchez-Gil, 2007).

Como un ejemplo para validar nuestra implementación del caso 2D, en la figura

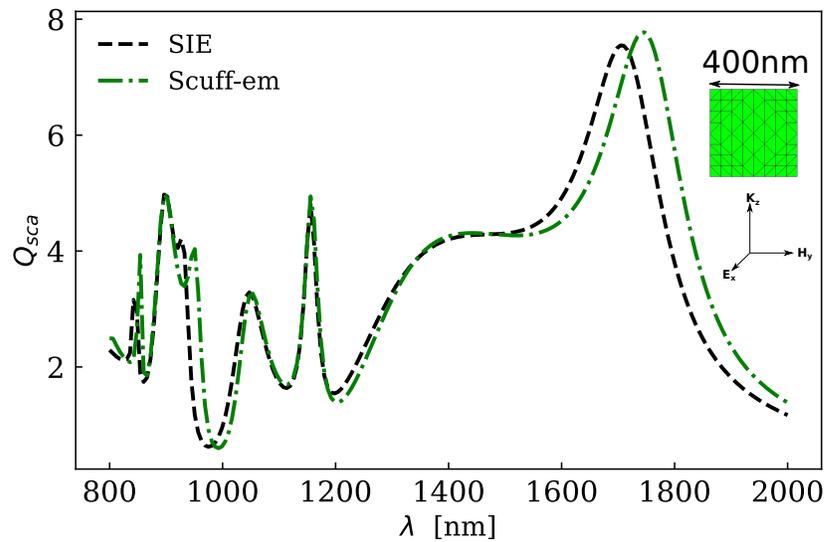


Figura 18. Comparación de la eficiencia esparcida para una cubo de Si de lado de 400 nm, entre el SIE (línea discontinua negra) y el código scuff-em (línea discontinua verde). Se ilustra la geometría del problema de esparcimiento.

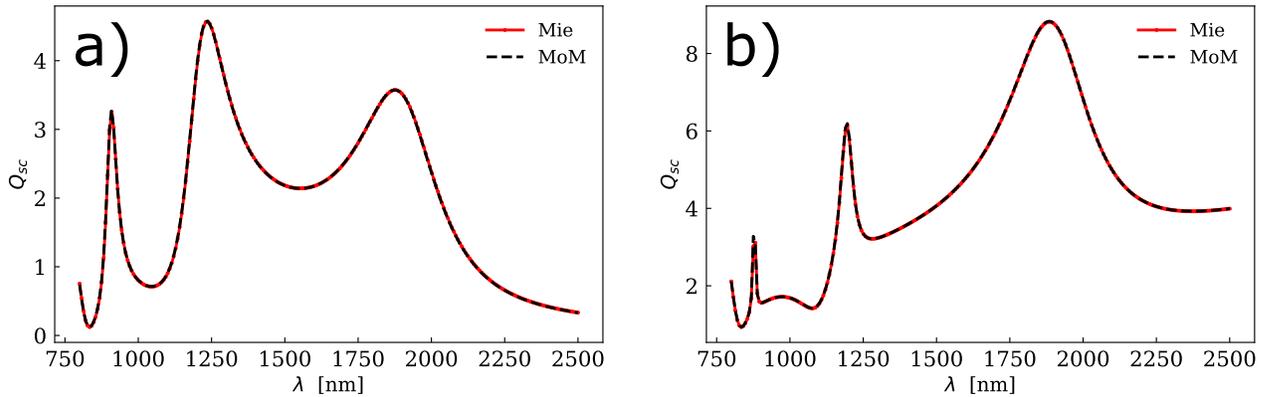


Figura 19. Comparación entre el MoM y la solución de Mie para la eficiencia de esparcimiento por un cilindro infinito de Si con $R = 200$ nm en (a) polarización p y (b) polarización s .

19 presentamos comparaciones con la solución tipo Mie para un cilindro infinito. Consideramos un cilindro de Si con radio de 200 nm en iluminación p (Figura 19-a)) y en iluminación s (Figura 19-b)). Observamos que para este problema los resultados numéricos y analíticos coinciden muy bien en ambos casos.

En la siguiente sección usaremos la implementación del SIE desarrollada para estudiar un problema específico como lo es el análisis de las resonancias de Fano que ocurren en cilindros finitos dieléctricos, con radios del orden de cientos de nanómetros y largos del orden de medio micrómetro. Compararemos los resultados calculados por nuestra implementación con los resultados que reportamos previamente en donde empleamos el código Scuff-em (Abujetas *et al.*, 2017).

4.7. Resonancias de Fano en cilindros finitos dieléctricos

Las resonancias de Fano son resonancias asimétricas que ocurren debido a la interferencia entre una resonancia estrecha y un continuo, o una resonancia muy amplia (Fano, 1935). Estas resonancias han sido ampliamente estudiadas en áreas como la plasmónica y metamateriales debido a sus potenciales aplicaciones (Miroshnichenko *et al.*, 2010; Luk'yanchuk *et al.*, 2010). En general, para observar resonancias de Fano intensas se han empleado nanoestructuras metálicas complejas (Miroshnichenko *et al.*, 2010), mientras que las resonancias observadas en geometrías metálicas más simples son poco intensas (López-Tejeira *et al.*, 2012).

Motivados por la gran variedad de modos eléctricos y magnéticos que se pueden excitar en partículas dieléctricas de alto índice de refracción, recientemente estudiamos el esparcimiento producido por cilindros finitos dieléctricos aislados en donde reportamos la observación de resonancias de Fano estrechas e intensas (Abujetas *et al.*, 2017). En la figura 20, presentamos cálculos numéricos de la eficiencia de esparcimiento en los que se varió el largo L del nanoalambre para un radio fijo de 80 nm, obtenidos con el software Scuff-em. Con el propósito de aislar el efecto de la longitud del alambre en las resonancias, empleamos un valor constante del índice de refracción de $n = 3.5$ para el rango espectral estudiado de 400 nm - 1000 nm.

Con referencia a la figura, dejando de lado las resonancias suaves e independientes del largo L , que asociamos con las resonancias de órdenes bajos de un cilindro infinito (multipolos de Mie), podemos observar que aparecen unas resonancias muy estrechas que se desplazan hacia el rojo a medida que aumentamos el largo del cilindro y que cruzan de distintas formas las resonancias más amplias. Esencialmente, estas resonancias las atribuimos a resonancias Fabry-Perot que ocurren a los modos guiados que soporta el nanoalambre semiconductor (Paniagua-Dominguez *et al.*, 2013). Si sólo consideramos modos guiados, dadas las dimensiones del nanoalambre y la región espectral estudiada, el nanoalambre sólo soporta tres modos guiados, los modos transversales TE_{01} y TM_{01} , así como el modo híbrido HE_{11} . Las resonancias Fabry-Perot correspondientes a cada polarización se encuentran superpuestas en la figura, en donde el superíndice denota el l -ésimo orden Fabry-Perot.

En particular, para el caso de polarización p (parte superior de la figura 20), obser-

vamos que las resonancias que dependen de L coinciden casi perfectamente con los modos TE_{01}^l superpuestos. Similarmente, para el caso de polarización s (parte inferior de la figura 20) observamos que las resonancias en la eficiencia esparcida concuerdan muy bien con las resonancias Fabry-Perot HE_{11}^l .

Para ilustrar los resultados anteriores, en la figura 21 presentamos la eficiencia esparcida para un cilindro de radio 80 nm y largo de 600 nm iluminado en polarización p (línea continua azul). En la misma figura se incluye el cálculo analítico obtenido para un cilindro infinito del mismo radio (línea discontinua verde). Al comparar ambos resultados podemos caracterizar las resonancias amplias con las excitaciones del dipolo eléctrico @ $\lambda = 490$ nm y del dipolo magnético @ $\lambda = 740$ nm. Esto concuerda con el cálculo de la amplitud del campo eléctrico mostrado a estas resonancias. Además, el cálculo numérico muestra tres resonancias muy estrechas, en particular, vemos que dos de ellas (@ $\lambda = 525$ nm y @ $\lambda = 635$ nm) son resonancias intensas y asimétricas. Los mapas del campo eléctrico dentro del cilindro muestran que estas resonancias de Fano corresponden a los modos guiados TE_{01}^5 y TE_{01}^3 predichos por la condición de Fabry-Perot.

En la figura 22, presentamos la eficiencia esparcida por un cilindro finito de largo 500 nm y radio 80 nm iluminado en polarización s (línea continua azul). Al comparar el cálculo numérico con el cálculo analítico para un cilindro infinito del mismo radio (línea verde discontinua), podemos caracterizar dos de las resonancias (b_2 @480 nm y b_1 @800 nm) con excitaciones multipolares. Esto concuerda con el cálculo mostrado a estas resonancias de la amplitud del campo eléctrico dentro del cilindro. Además de las resonancias mencionadas, el cálculo numérico presenta unas resonancias estrechas a 540 nm y 670 que corresponden a los modos guiados HE_{11}^5 y HE_{11}^3 , determinados por la condición de Fabry-Perot. Esto puede también confirmarse de los cálculos de la amplitud del campo eléctrico mostrado en las resonancias.

Como mencionamos anteriormente, los resultados numéricos de la eficiencia de esparcimiento para los cilindros finitos dieléctricos se obtuvieron empleando el código abierto Scuff-em. A continuación, con el propósito de validar nuestra implementación del SIE presentado en secciones anteriores. Buscamos reproducir los cálculos empleados en la publicación. Para esto consideramos un cilindro dieléctrico ($n = 3.5$) de largo $L = 600$ nm y radio $R = 80$ nm en iluminación p . En la figura 23 presentamos

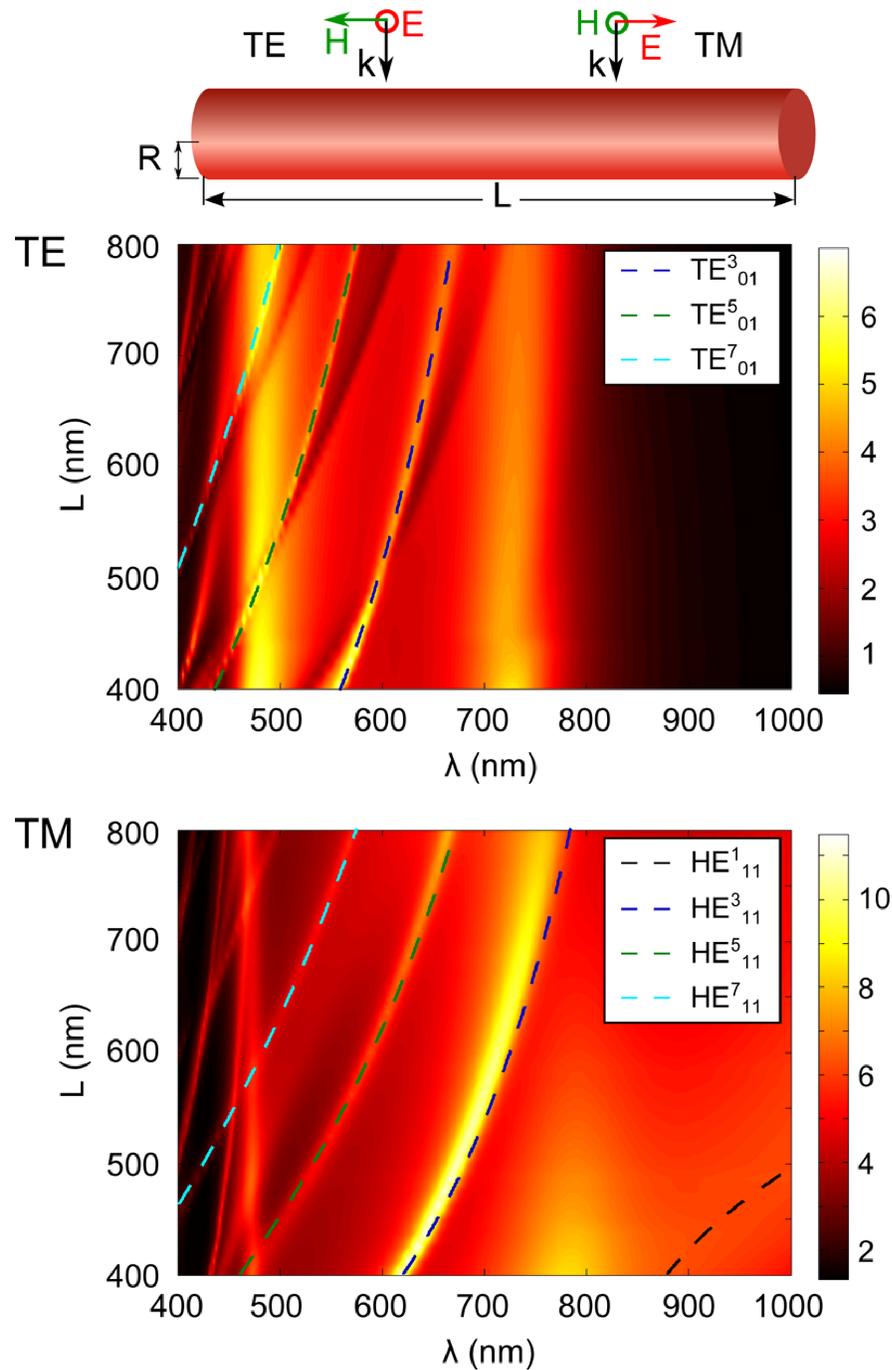


Figura 20. Mapas de falso color de la dependencia espectral de la eficiencia de esparcimiento Q_{sc} para un nanoalambre semiconductor finito ($n = 3.5$) de radio $R = 80$ nm en iluminación normal, variando el largo L . En polarización p o TE (arriba) y en polarización s TM (abajo). La condición de la resonancia de Fabry-Perot de los correspondientes modos guiados está superpuesta (curvas discontinuas de color).

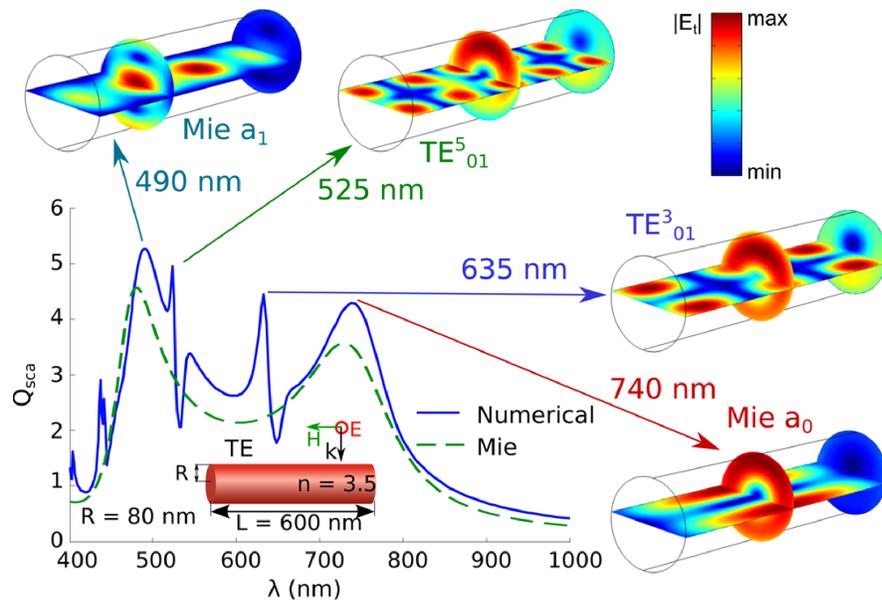


Figura 21. Dependencia espectral de la eficiencia de esparcimiento Q_{sc} en iluminación normal (modo p) para el nanoalambre semiconductor ($n = 3.5$) de radio $R = 80$ nm y largo de $L = 600$ nm, calculado numéricamente con el scuff-em (línea continua azul). También se incluyen cálculos analíticos para un cilindro de largo infinito del mismo radio (línea discontinua verde). Se incluyen cálculos del campo total dentro del cilindro para diferentes longitudes de onda que corresponden a las resonancias de Mie y de Fabry-Perot.

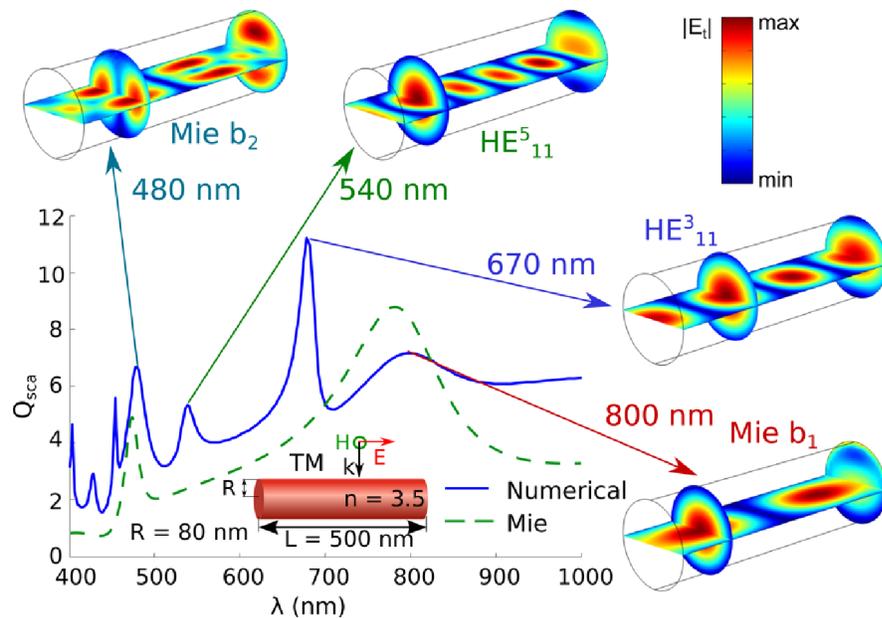


Figura 22. Dependencia espectral de la eficiencia de esparcimiento Q_{sc} en iluminación normal (modo s) para el nanoalambre semiconductor ($n = 3.5$) de radio $R = 80$ nm y largo de $L = 500$ nm, calculado numéricamente con el scuff-em (línea continua azul). También se incluyen cálculos analíticos para un cilindro de largo infinito del mismo radio (línea discontinua verde). Se incluyen cálculos del campo total dentro del cilindro para diferentes longitudes de onda que corresponden a las resonancias de Mie y de Fabry-Perot.

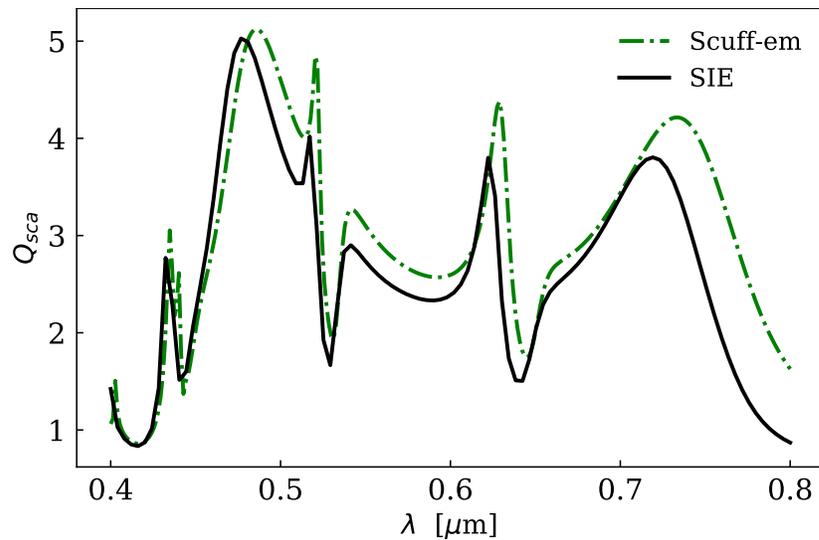


Figura 23. Comparación de la eficiencia esparcida calculada con el software Scuff-em y el SIE para un cilindro dieléctrico ($n = 3.5$) de 600 nm de largo y un radio de 80 nm iluminado en polarización p .

una comparación de la eficiencia esparcida dada por el código Scuff-em (línea verde discontinua) y nuestra implementación del SIE (línea continua negra). Ambas implementaciones muestran las resonancias asimétricas asociadas a las resonancias tipo Fabry-Perot. Sin embargo, tiende a haber un corrimiento hacia el azul en los resultados obtenidos con el SIE y hay algunas diferencias en la eficiencia. Esto puede deberse a que no se empleó el mismo mallado en los códigos y/o a la elección de cuadraturas al realizar las integrales entre parejas de triángulos.

En la figura 24, presentamos otra comparación de la eficiencia de esparcimiento del cilindro de la figura 23 pero en iluminación s . Para este caso podemos apreciar diferencias más notables entre los códigos. Aunque ambos reproducen la resonancia por arriba de $0.7 \mu\text{m}$ y la resonancia por abajo de $0.6 \mu\text{m}$, los cálculos poseen diferencias para las eficiencias por debajo de $0.5 \mu\text{m}$.

De las comparaciones, podemos decir que en general ambas implementaciones reproducen los detalles asociados a los procesos físicos involucrados. Sin embargo, las discrepancias de los resultados indican que debemos continuar trabajando en nuestra implementación, ya sea para poder comparar los códigos en igualdad de condiciones (igual mallado y misma cuadratura gaussiana) o depurar el código buscando algún error. Otra cuestión y que puede originar las diferencias, es el tratamiento y criterio de aplicación de la sustracción de la singularidad. Aunque en principio el método puede aplicarse para toda R y mejorar la exactitud del cálculo numérico (con R la distancia

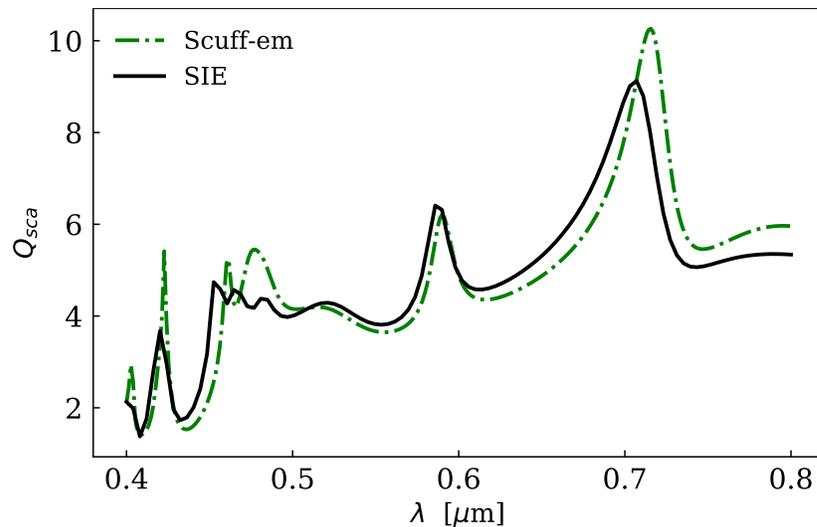


Figura 24. Comparación de la eficiencia esparcida calculada con el software Scuff-em y el SIE para un cilindro dieléctrico ($n = 3.5$) de 600 nm de largo y un radio de 80 nm iluminado en polarización s .

entre la pareja del punto de observación y el punto fuente). Esto incrementa enormemente el tiempo de cómputo. En particular, en este trabajo empleamos la condición de $Rk < 0.4$ para aplicar la sustracción de la singularidad (Kern, 2011).

Para finalizar el capítulo, presentamos un breve resumen de su contenido. En este capítulo hemos presentado una derivación de la ecuación integral de superficie para el cálculo del esparcimiento electromagnético en 3D. Esta técnica ha demostrado ser versátil y, comparada con otros métodos, conduce a cálculos que son relativamente rápidos y poco demandantes de cómputo. También hemos presentado cálculos que nos han permitido validar nuestras implementaciones para los códigos en tres y dos dimensiones. En particular, para el caso 3D aplicamos nuestro programa al estudio de las resonancias que ocurren en cilindros dieléctricos de longitud finita y los comparamos con los resultados obtenidos previamente empleando el software scuff-em. Aunque los resultados muestran las mismas resonancias y las curvas son muy parecidas, hay discrepancias que por el momento no hemos sabido explicar y que indican que debemos revisar nuestra implementación de los códigos con más profundidad. En el siguiente capítulo usaremos los métodos integrales mostrados aquí para calcular el campo esparcido en dos y tres dimensiones, para posteriormente analizarlo en términos de sus contribuciones multipolares.

Capítulo 5. Método para la descomposición multipolar del campo esparcido

En este capítulo presentamos una técnica para descomponer el campo esparcido de una partícula aislada, iluminada por una onda plana monocromática, en términos de sus contribuciones multipolares eléctricas y magnéticas. Esta descomposición multipolar nos dará información de como se distribuye la carga en la partícula y nos ayudará a entender la forma del campo lejano. Incluso, al sintonizar uno u otro multipolo nos permitirá controlar hasta cierto punto la forma del campo lejano. Asimismo, empleando el análisis multipolar podremos discernir entre efectos debidos a una partícula aislada o a un arreglo de ellas.

Primero presentamos el caso 3D, en el que redefinimos los vectores armónicos que empleamos para el caso de una partícula esférica (Sección 3.2) en términos de una base ortonormal, lo que facilita el cálculo de los coeficientes multipolares eléctricos y magnéticos. El método se ilustra a través de varios ejemplos. Después, mostramos la descomposición multipolar para partículas que poseen invariancia en una dirección o partículas 2D. Para este caso, el campo esparcido se expresa en la base de la solución tipo Mie para un cilindro infinito en iluminación normal (Sección 3.3).

Finalmente, presentamos un trabajo en el que empleamos el análisis multipolar en dos dimensiones para encontrar condiciones en las que se puede diseñar un espejo magnético (la diferencia de fase del campo eléctrico reflejado e incidente es de cero), con una estructura dieléctrica periódica sublongitud de onda (González-Alcalde *et al.*, en revisión 2019).

5.1. Descomposición multipolar caso 3D

Para facilitar el cálculo de los coeficientes multipolares en tres dimensiones, expresaremos los campos esparcidos en términos de vectores armónicos ortonormales, que

definidos como

$$\mathbf{Y}_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\theta, \phi) \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (104)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{lm}(\theta, \phi) &= \frac{i}{\sqrt{l(l+1)}} \nabla \times (\mathbf{r} Y_{lm}(\theta, \phi)), \\ &= \frac{i}{\sqrt{l(l+1)}} \left[\frac{im}{\sin \theta} Y_{lm} \hat{\mathbf{e}}_\theta - \frac{\partial Y_{lm}}{\partial \theta} \hat{\mathbf{e}}_\phi \right], \end{aligned} \quad (105)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{lm}(\theta, \phi) &= \hat{\mathbf{e}}_r \times \mathbf{X}_{lm}, \\ &= \frac{i}{\sqrt{l(l+1)}} \left[\frac{\partial Y_{lm}}{\partial \theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta + \frac{im}{\sin \theta} Y_{lm} \hat{\mathbf{e}}_\phi \right], \end{aligned} \quad (106)$$

donde $Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$ son los armónicos esféricos.

Los vectores armónicos (104)-(106) son ortonormales en el sentido de que $\langle \mathbf{F} | \mathbf{G} \rangle = 0$ y $\langle \mathbf{F} | \mathbf{F} \rangle = 1$, con $\{\mathbf{F}, \mathbf{G}\}$ cualquiera de los tres vectores armónicos, y donde definimos el producto interno como $\langle \mathbf{F} | \mathbf{G} \rangle = \int \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{G} d\Omega$, con $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$.

A continuación expresaremos los vectores armónicos $\{\mathbf{M}_{lm}, \mathbf{N}_{lm}\}$ de la base de Mie en función de $\{\mathbf{Y}_{lm}(\theta, \phi), \mathbf{X}_{lm}(\theta, \phi), \mathbf{Z}_{lm}(\theta, \phi)\}$. Para realizar esto, redefinimos la función generadora y los vectores armónicos esféricos fuera de la partícula de la forma

$$\psi_{lm} = h_l^{(1)}(\rho) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (107)$$

$$\mathbf{M}_{lm} = \frac{i}{\sqrt{l(l+1)}} \nabla \times (\mathbf{r} \psi_{lm}) = h_l^{(1)}(\rho) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \phi), \quad (108)$$

$$\mathbf{N}_{lm} = \frac{1}{k} \nabla \times \mathbf{M}_{lm} = \left(\underline{h_l(\rho)} + [h_l^{(1)}(\rho)]' \right) \mathbf{Z}_{lm}(\theta, \phi) + i \sqrt{l(l+1)} \underline{h_l(\rho)} \mathbf{Y}_{lm}(\theta, \phi). \quad (109)$$

donde $\underline{h_l(\rho)} = \frac{h_l^{(1)}(\rho)}{\rho}$.

Empleando los vectores armónicos ortogonales los campos esparcidos son (Jackson,

2012; Grahn *et al.*, 2012)¹

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l E_{lm} (\alpha_E(l, m) \mathbf{N}_{lm} + a_m(l, m) \mathbf{M}_{lm}), \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l E_{lm} \left(\frac{\alpha_E(l, m)}{k} \nabla \times [h_l^{(1)}(\rho) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \phi)] + a_M(l, m) h_l^{(1)}(\rho) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \phi) \right),\end{aligned}\quad (110)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_{sc}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{iZ_0} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l E_{lm} (\alpha_E(l, m) \mathbf{M}_{lm} + a_m(l, m) \mathbf{N}_{lm}), \\ &= \frac{1}{iZ_0} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l E_{lm} \left(\frac{\alpha_M(l, m)}{k} \nabla \times [h_l^{(1)}(\rho) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \phi)] + \alpha_E(l, m) h_l^{(1)}(\rho) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \phi) \right),\end{aligned}\quad (111)$$

donde $E_{lm} = E_0 i^l \sqrt{\pi(2l+1)}$.

Normalmente, para calcular los coeficientes se proyectan los campos eléctrico o magnético en los vectores ortogonales $\{\mathbf{M}_{lm}, \mathbf{N}_{lm}\}$ y se integra sobre una esfera virtual que encierre totalmente a la partícula:

$$\alpha_E(l, m) = \frac{1}{E_{lm}} \frac{\langle \mathbf{N}_{lm} | \mathbf{E}_{sc} \rangle}{\langle \mathbf{N}_{lm} | \mathbf{N}_{lm} \rangle}, \quad \alpha_M(l, m) = \frac{1}{E_{lm}} \frac{\langle \mathbf{M}_{lm} | \mathbf{E}_{sc} \rangle}{\langle \mathbf{M}_{lm} | \mathbf{M}_{lm} \rangle}. \quad (112)$$

Una manera más simple de calcular los coeficientes multipolares consiste en aprovechar las propiedades de ortonormalidad de $\{\mathbf{Y}_{lm}(\theta, \phi), \mathbf{X}_{lm}(\theta, \phi), \mathbf{Z}_{lm}(\theta, \phi)\}$, proyectando los campos (110) y (111) en la función vectorial $\mathbf{Y}_{lm}(\theta, \phi)$ y usando (109). Realizando lo anterior, vemos que los coeficientes se pueden expresar sólo en términos de las componentes radiales de los campos como (Lambert, 1978)

$$\alpha_E(l, m) = \frac{-i}{h_l(\rho_0) E_{lm} \sqrt{l(l+1)}} \langle \mathbf{Y}_{lm}(\theta, \phi) | \mathbf{E}_{sc}(r_0, \theta, \phi) \rangle, \quad (113)$$

$$\alpha_M(l, m) = \frac{Z_0}{h_l(\rho_0) E_{lm} \sqrt{l(l+1)}} \langle \mathbf{Y}_{lm}(\theta, \phi) | \mathbf{H}_{sc}(r_0, \theta, \phi) \rangle, \quad (114)$$

donde $\rho_0 = kr_0$ y r_0 es un radio de una esfera virtual que contiene totalmente a la

¹En esta sección definimos los vectores armónicos para que los campos esparcidos fueran consistentes con la referencia (Grahn *et al.*, 2012). La definición del prefactor E_{lm} , la convención de signos y la normalización varían de autor a autor.

partícula.

Una vez que se tienen los coeficientes multipolares, la sección transversal de esparcimiento puede calcularse de la forma (Grahn *et al.*, 2012)

$$C_{sc} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (2l+1) [|a_E(l, m)|^2 + |a_M(l, m)|^2]. \quad (115)$$

En particular, si el problema de esparcimiento tiene simetría azimutal puede mostrarse que la amplitud de los coeficientes para m negativas cumplen con la relación $|a_{E,M}(l, m)| = |a_{E,M}(l, -m)|$ (Sarkar y Halas, 1997). Como ocurre para la partícula esférica iluminada por una onda plana.

5.1.1. Cálculo numérico de los coeficientes en 3D

Para ilustrar el método de la descomposición multipolar, consideramos una partícula esférica de Si de radio $R = 230$ nm a la longitud de onda $\lambda = 1272$ nm que coincide con la resonancia del dipolo eléctrico. Para obtener los coeficientes primero calculamos numéricamente los campos eléctrico y magnético para 2500 puntos distribuidos uniformemente en una esfera virtual de radio $r_0 = 300$ nm. En la figura 25, presentamos la magnitud al cuadrado del campo eléctrico (izquierda) y magnético (derecha). Observamos que de la estructura de los campos cercanos es difícil discernir qué multipolos se excitan a esta longitud de onda.

Con el propósito de reducir el error en el cálculo de los coeficientes, interpolamos los campos como una función de las coordenadas angulares (θ, ϕ) . Posteriormente proyectamos la componente radial de los campos (a lo largo de $\hat{\mathbf{e}}_r$) sobre los armónicos esféricos empleando las ecuaciones (113) y (114). En la tabla 1, presentamos una comparación de la magnitud de los primeros coeficientes eléctricos y magnéticos obtenidos numéricamente (superíndice D.M.) y analíticamente (superíndice Mie). Observamos que los coeficientes calculados numéricamente son una buena aproximación a los obtenidos por la solución analítica. Además, podemos discernir a través de los coeficientes que la excitación corresponde, en mayor medida, a un dipolo eléctrico. Lo cual esperábamos ya que escogimos la longitud de onda de la resonancia del dipolo eléctrico. El cálculo de los coeficientes puede mejorarse, integrando muy cerca de la partícula, empleando más puntos para el cálculo de los mapas, y/o usando cuadratura

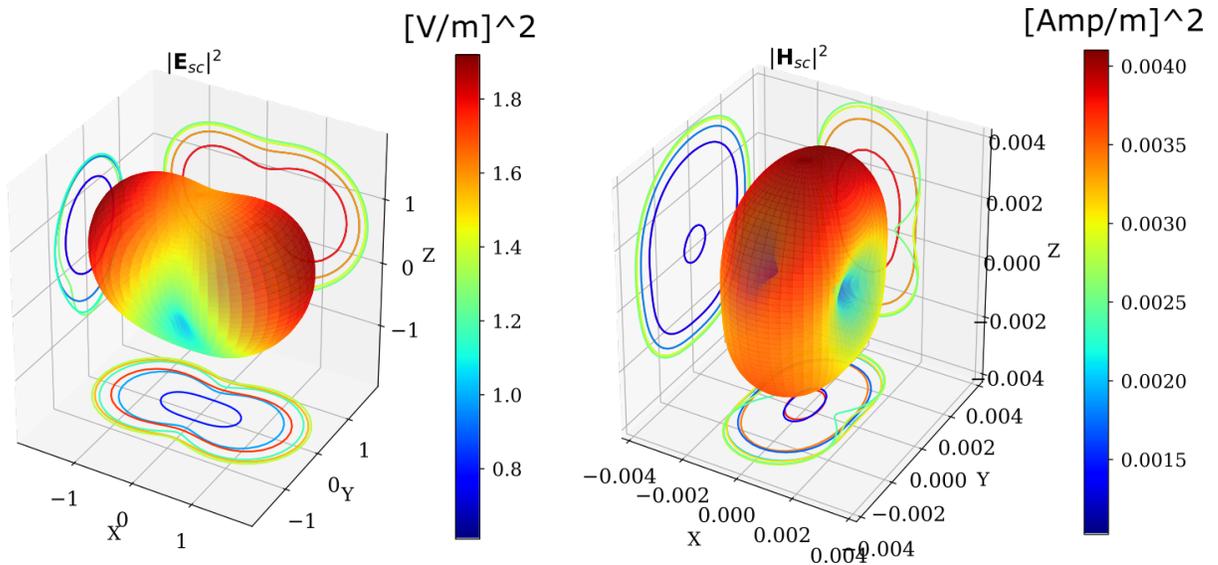


Figura 25. Magnitud al cuadrado de los campos esparcidos por una esfera de radio $R = 230$ nm de Si. El campo eléctrico (izquierda) y el campo magnético (derecha), obtenidos en una esfera virtual de radio $r_0 = 300$ nm.

de mayor orden en la integración.

Tabla 1. Primeros coeficientes eléctricos y magnéticos para una esfera de radio $R = 230$ nm a la resonancia del dipolo eléctrico @ $\lambda = 1272$ nm. El superíndice *D.M.* indica los coeficientes calculados numéricamente, mientras que el superíndice *Mie* indica los coeficientes obtenidos con la solución analítica.

l	$ a_E^{D.M.}(l, 1) $	$ a_E^{Mie}(l, 1) $	$ a_M^{D.M.}(l, 1) $	$ a_M^{Mie}(l, 1) $
1	0.9908	0.9975	0.3755	0.3738
2	0.0546	0.05735	0.0652	0.0738
3	0.0015	0.0016	0.00050	0.00055

Como otro ejemplo del método, consideremos la partícula cúbica de Si de 400 nm de lado, cuya eficiencia de esparcimiento presentamos en la figura 18. En particular, si empleamos la descomposición multipolar a la resonancia de ~ 1700 nm obtenemos los coeficientes de la tabla 2. De donde observamos que esta resonancia tiene contribuciones mayoritariamente debidas al dipolo eléctrico $|a_E(1, 1)|$ y al dipolo magnético $|a_M(1, 1)|$. Sin embargo, la contribución del dipolo magnético a la eficiencia es $\frac{|a_M(1,1)|^2}{|a_E(1,1)|^2} \sim 2.1$ veces mayor, por lo que se espera que en el campo lejano predomine esta contribución. El resultado anterior, concuerda con la sección transversal de radar que presentamos en la figura 26. Observamos que el patrón de radiación es parecido al que se obtiene por la excitación de un dipolo magnético.

Los resultados anteriores muestran la utilidad de emplear los métodos de descom-

Tabla 2. Primeros coeficientes eléctricos y magnéticos para una cubo de lado $L = 400$ nm a la resonancia del dipolo magnético @ $\lambda = 1700$ nm.

l	$ a_E(l, 1) $	$ a_M(l, 1) $
1	0.6247	0.9090
2	0.0303	0.0039
3	0.0026	0.0019

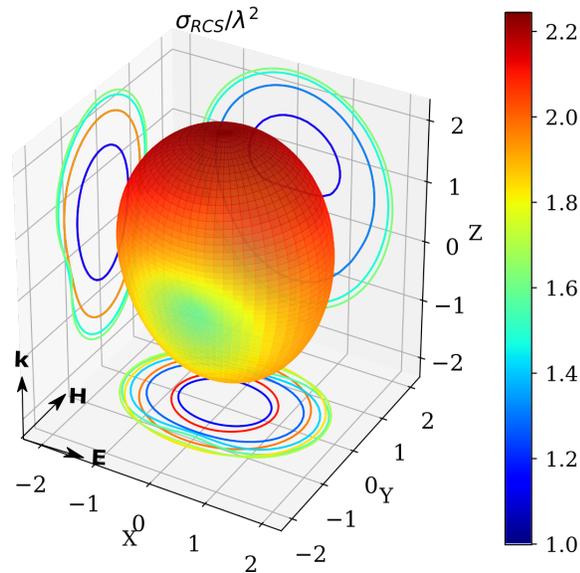


Figura 26. Sección transversal de radar para un cubo de Si de lado $L = 4 \mu\text{m}$ a @ $\lambda = 1700$ nm. Se observa el patrón de radiación en el que domina la contribución del dipolo magnético.

posición multipolar en problemas de esparcimiento. Sin embargo, realizar la expansión del campo esparcido en tres dimensiones para cada longitud de onda es muy demandante computacionalmente. Por esta razón, esperamos en un futuro mejorar la eficiencia de los códigos. A continuación presentamos la teoría para el caso de dos dimensiones.

5.2. Descomposición multipolar - Caso 2D

Con referencia a la figura 27, consideramos ahora una partícula con invariancia en la dirección del eje x_2 que es iluminada por una onda plana monocromática que viaja en la dirección x_1 . Al igual que en el caso del cilindro infinito en iluminación normal (Sección 3.3), el problema de esparcimiento de partículas con invariancia en una dirección puede tratarse esencialmente como un problema escalar con dos modos independientes de polarización p y s . Asimismo, anteriormente mencionamos que los

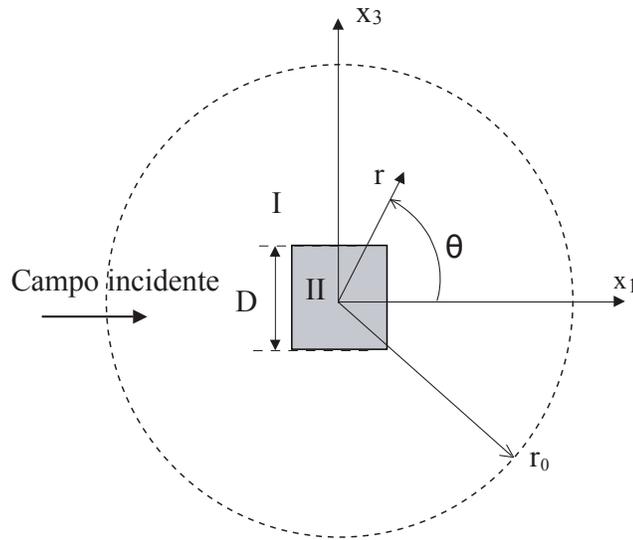


Figura 27. Ilustración de la situación física considerada. El eje x_2 es perpendicular al plano de la figura.

vectores armónicos usados en la teoría de Mie forman una base ortogonal por lo que cualquier campo puede ser expresado como una superposición de ellos. Por todo lo anterior, el campo esparcido fuera de un cilindro virtual que contiene al objeto esparcador en coordenadas cilíndricas puede expresarse de la forma (Panofsky y Phillips, 2005)

$$\psi_{sc}^{(I)}(r, \theta) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m i^m H_m^{(1)}(kr) e^{im\theta}, \quad (116)$$

donde hemos denotado por $\psi^{(I)}(r, \theta)$ la componente x_2 del campo magnético (en polarización p) o del campo eléctrico (en polarización s) en el medio I , y donde a_m representan los coeficientes de la expansión.

La ecuación (116) puede reescribirse de una manera conveniente empleando la fórmula de Euler y la relación $H_{-m}^{(1)}(x) = (-1)^m H_m^{(1)}$ (Petschulat et al., 2010):

$$\psi_{sc}^{(I)}(r, \theta) = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m^+ \psi_m^+(r, \theta) + \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m^- \psi_m^-(r, \theta), \quad \forall \mathbf{r} \in R^I, \quad (117)$$

donde

$$\psi_m^{\pm}(r, \theta) = i^m H_m^{(1)}(kr) \begin{Bmatrix} \cos m\theta \\ i \sin m\theta \end{Bmatrix}, \quad (118)$$

$$\alpha_m^{\pm} = (\alpha_m \pm \alpha_{-m}), \quad \alpha_0^+ = \alpha_0.$$

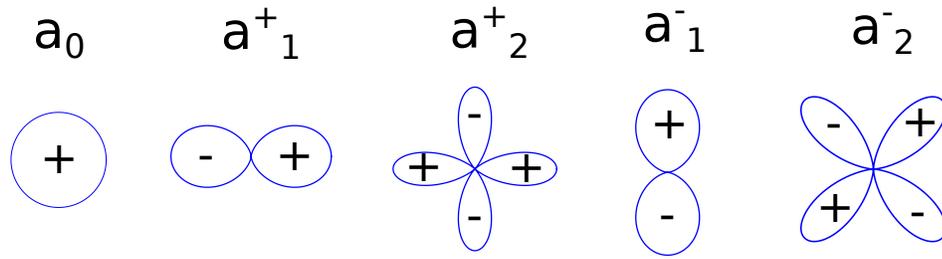


Figura 28. Patrones angulares de los primeros coeficientes de Mie, simétricos y antisimétricos. El signo del campo en la figura corresponde al campo que esté a lo largo del eje de simetría x_2 .

Podemos observar de las ecuaciones (117) y (118) que para cada orden m existen dos contribuciones rotadas azimutalmente por un ángulo $\frac{\pi}{2m}$ entre ellas, denotadas por el superíndice \pm (Figura 28). En particular la base ψ_m^+ contiene funciones que son simétricas con respecto a la dirección de incidencia (eje x_1), mientras que la base ψ_m^- contiene funciones que son antisimétricas para esta dirección. En otras palabras, la ecuación (117) es una representación del campo esparcido en términos de funciones pares e impares. En general se requieren las dos bases para describir el campo esparcido, excepto con partículas y campos que sean simétricos con respecto al plano x_1 - x_2 , en los que no se excitarán términos de la base impar.

Al igual que hicimos con los coeficientes de Mie a_m , podemos asociar a los coeficientes a_m^\pm con las excitaciones multipolares. Para el caso de polarización p el coeficiente a_0 corresponde al dipolo magnético (MD), a_1^\pm al dipolo eléctrico (ED) y a_2^\pm al cuadrupolo eléctrico (EQ)². Mientras que para polarización s los primeros coeficientes corresponden al dipolo eléctrico y al dipolo magnético, respectivamente.

Para realizar la descomposición multipolar necesitamos calcular los coeficientes a_m^\pm del campo esparcido, esto se hace proyectando el campo esparcido $\psi_{sc}^{(I)}(r, \theta)$ en las eigenfunciones $\psi_m^\pm(r, \theta)$ de la forma (Bohren y Huffman, 2008)

$$a_m^\pm = \frac{\int_0^{2\pi} \psi_{sc}^{(I)}(r_0, \theta) \psi_m^{\pm*}(r_0, \theta) d\theta}{\int_0^{2\pi} |\psi_m^\pm(r_0, \theta)|^2 d\theta}, \quad (119)$$

donde r_0 es un radio imaginario centrado en el origen que encierra totalmente a la partícula³.

²En donde empleamos las siglas en inglés MD de magnetic dipole, ED de electric dipole y EQ de electric quadrupole.

³Para obtener los coeficientes es suficiente con evaluar r a un r_0 e integrar sobre θ , pero se puede usar una integral sobre el radio para mejorar la estabilidad numérica.

Para facilitar la descomposición multipolar podemos emplear la expresión del campo esparcido para valores grandes de r en términos de amplitud de esparcimiento $S(\theta)$ de la forma (Bohren y Huffman, 2008; Valencia *et al.*, 2004)

$$\psi_{sc}^{(I)}(r, \theta) = e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{e^{ikr}}{\sqrt{8\pi kr}} S(\theta). \quad (120)$$

Sustituyendo la ecuación del campo lejano (120) y las eigenfunciones (118) en la ecuación (119) podemos calcular los coeficientes multipolares empleando la expresión

$$\alpha_m^\pm = \frac{i}{4\pi} \int_0^{2\pi} S(\theta) \begin{Bmatrix} \cos m\theta \\ -i \sin m\theta \end{Bmatrix} d\theta, \quad (121)$$

y para $m = 0$,

$$\alpha_0 = \frac{i}{8\pi} \int_0^{2\pi} S(\theta) d\theta. \quad (122)$$

Con los coeficientes α_m^\pm podemos calcular la eficiencia de esparcimiento total de la forma

$$Q_{sca} = \frac{4}{kD} \left[|\alpha_0|^2 + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} (|\alpha_m^+|^2 + |\alpha_m^-|^2) \right], \quad (123)$$

y la eficiencia de esparcimiento por ángulo como

$$q(\theta) = \frac{2}{\pi kD} \left| \alpha_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m^+ \cos m\theta + \alpha_m^- \sin m\theta \right|^2. \quad (124)$$

Con la ecuación (123) podemos obtener de manera independiente las contribuciones que tiene cada multipolo a la eficiencia total del esparcimiento. Mientras que con la ecuación (124) podemos analizar el patrón angular del campo lejano usando los multipolos.

A continuación empleando la descomposición multipolar 2D, exploramos una metodología para el diseño de espejos magnéticos utilizando rejillas de Silicio de sublongitud de onda (González-Alcalde, 2016).

5.3. Espejo dieléctrico magnético

El diseño de rejillas sublongitud de onda que funcionan como espejos dieléctricos ha sido abordado por varios autores (Mateus *et al.*, 2004; Ricciardi *et al.*, 2010). Para el caso del Silicio, se ha encontrado que estas estructuras funcionan como espejos de alta reflectividad en una región relativamente ancha del infrarojo cercano. Esto resulta interesante ya que en esta región del espectro el Si es prácticamente transparente y las pérdidas por absorción son muy bajas. La mayoría de los trabajos se han centrado en el diseño y optimización de dichas estructuras para maximizar la reflectividad, sin explorar las propiedades inherentes de partículas de materiales de alto índice de refracción. Específicamente, la excitación de resonancias eléctricas y magnéticas. Esto, abre la posibilidad de diseñar espejos dieléctricos magnéticos (Liu *et al.*, 2014), que presentan grandes diferencias con respecto a los espejos metálicos. En particular, los espejos magnéticos no presentan una diferencia de fase entre el campo eléctrico reflejado y el campo eléctrico incidente. Lo que implica que el campo eléctrico total se maximiza en la frontera.

A continuación, exploramos un posible procedimiento para diseñar estructuras periódicas dieléctricas que se comportan como espejos magnéticos. Cálculos recientes muestran que es posible lograr esto para longitudes de onda del infrarrojo cercano con una estructura periódica de rectángulos de Si, con dimensiones $420 \text{ nm} \times 316 \text{ nm}$ y periodo de $\Lambda = 576 \text{ nm}$ (González-Alcalde, 2016). Se trata de una rejilla sublongitud de onda de Si cuyas propiedades normalmente se interpretan en la literatura en términos de la excitación de modos colectivos (Magnusson y Shokooh-Saremi, 2008; Karagodsky *et al.*, 2010). Sin embargo, en este trabajo mostramos que hay propiedades ópticas de dichas estructuras que se pueden heredar directamente de las propiedades de las partículas individuales. Para realizar esto, empezaremos considerando el esparcimiento por partículas de Si que son invariantes en una dirección que, al replicarlas, producen las rejillas considerado, que se pueden interpretar como metasuperficies⁴. Los resultados que mostraremos a continuación culminaron en la publicación (González-Alcalde *et al.*, en revisión 2019).

⁴Obviamente, al ir agregando partículas se consideran efectos de interacción entre partículas.

5.3.1. Análisis de una sola partícula

Iniciamos el análisis buscando las condiciones necesarias para que la luz esparcida hacia atrás se encuentre en fase con el campo incidente. Para esto, consideremos la situación física de la figura 27. Supondremos que la partícula es invariante a lo largo de la dirección x_2 y que estamos iluminando con una onda plana que viaja en la dirección de x_1 con polarización p .

Como mencionamos anteriormente, para este tipo de problemas el campo esparcido puede expresarse en términos de sus contribuciones multipolares empleando la ecuación (117). Además, como la partícula que consideramos es simétrica con respecto al plano x_1 - x_2 , sólo necesitamos los multipolos de la base par ψ_m^+ para describir el campo esparcido.

En particular, consideramos los primeros tres multipolos de la base par, que ilustramos en el panel derecho de la figura 29. Presentamos el campo magnético de los primeros tres multipolos para los cuales el signo del campo (olvidándonos por el momento del resto, que no es función de θ) está determinado por el coseno de la base par ($\text{sign}(\psi_m^+) = \text{sign}(\cos m\theta)$). Con el signo del campo magnético y de la dirección de esparcimiento podemos inferir la dirección y orientación vector del campo eléctrico en el campo lejano, situación que también ilustramos en la figura. Observamos de los gráficos que tanto el campo eléctrico del dipolo magnético y como el cuadrupolo eléctrico son antisimétricos con respecto al eje x_1 . Esto es, que los signos del campo esparcido hacia atrás y hacia adelante son opuestos. Esto contrasta con el caso del dipolo eléctrico en donde el campo eléctrico es simétrico con respecto al eje x_1 . El análisis anterior, concuerda con los mapas del campo cercano que ilustramos en el panel izquierdo de la misma figura.

Por otro lado, el teorema óptico nos dice que la extinción del campo incidente en la dirección frontal se debe a la interferencia entre el campo esparcido y el incidente. Por lo que podemos suponer que los campos en la dirección frontal deben estar fuera de fase, al menos en cierta medida. De los argumentos anteriores, concluimos que si queremos que el campo esparcido hacia atrás esté en fase con el campo incidente debemos excitar las resonancias del dipolo magnético y cuadrupolo eléctrico, evitando al mismo tiempo la excitación del dipolo eléctrico.

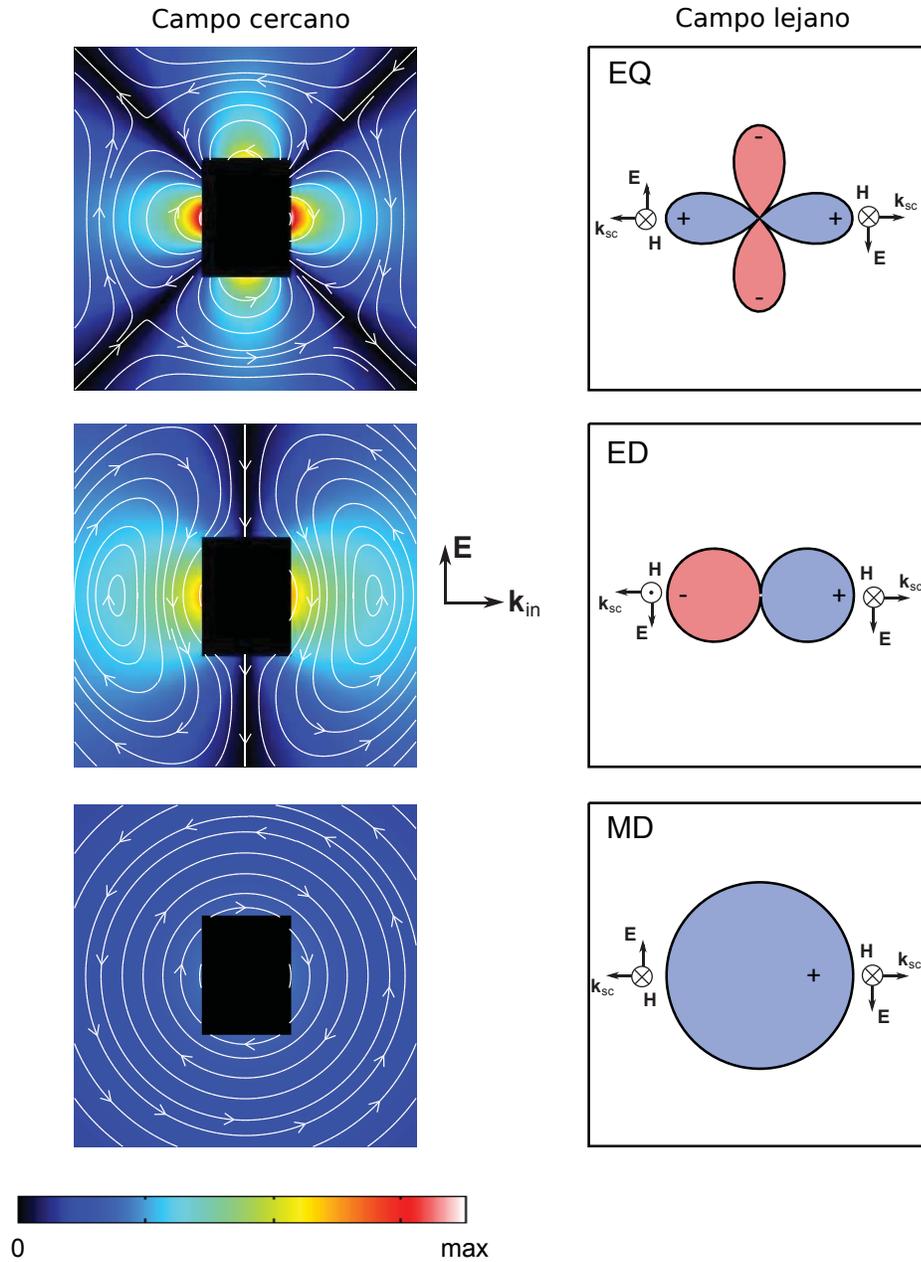


Figura 29. Patrones de radiación del campo cercano y lejano de un dipolo magnético, dipolo eléctrico y un cuadrupolo eléctrico en polarización p . Las líneas de flujo corresponden a las líneas del campo eléctrico.

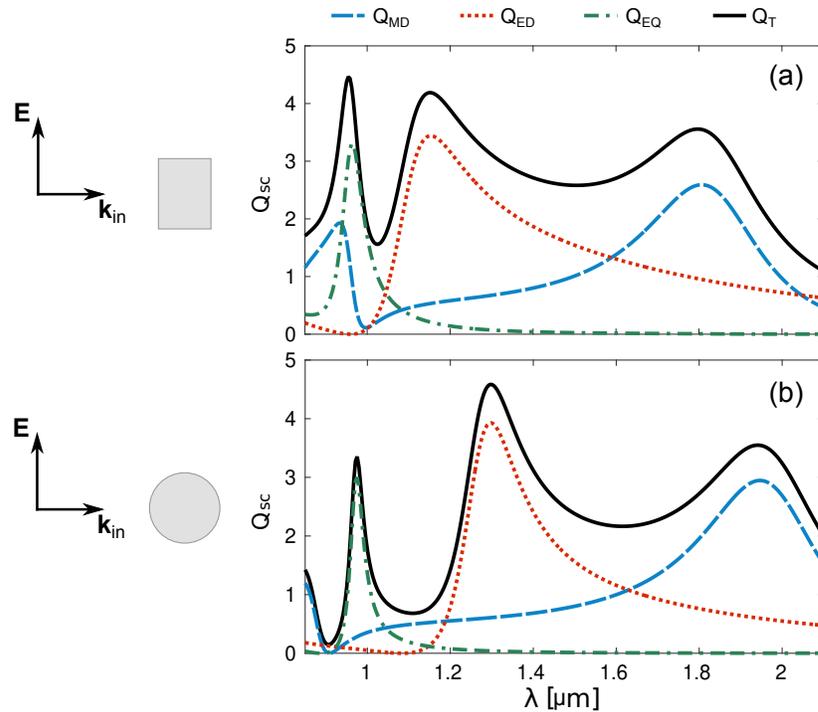


Figura 30. Eficiencia de esparcimiento total y de los primeros tres multipolos para una partícula rectangular (arriba), y una partícula cilíndrica (abajo). Asumimos que iluminamos con una onda plana con polarización p y que el medio de las partículas es silicio. La partícula rectangular tiene dimensiones 420 nm \times 316 nm y el diámetro del cilindro es de 420 nm.

Consideramos ahora la eficiencia total de esparcimiento y las contribuciones asociadas a los tres primeros multipolos, para partículas con secciones transversales rectangular y circular (Figura 30). La partícula rectangular tiene dimensiones de 420 nm \times 316 nm, mientras que el diámetro de la partícula circular es de $D = 420$ nm. Observamos que ambas partículas tienen resonancias de los primeros tres multipolos en la región del espectro estudiada. También observamos que para el caso de la partícula rectangular en la región espectral por abajo de $\lambda = 1 \mu\text{m}$ la contribución del dipolo eléctrico es casi nula. Esta región parece entonces prometedora para realizar un espejo magnético. Análogamente, para el caso del cilindro tenemos una situación similar en una región cercana por abajo de $1 \mu\text{m}$.

Para estudiar con más detalle esta conjetura, en la figura 31-(a) presentamos las fases relativas entre las contribuciones multipolares de la partícula rectangular. Observamos que el dipolo magnético y el cuadrupolo eléctrico se encuentran en fase para $\lambda = 904$ nm. Por lo anterior podemos suponer que para esta longitud de onda el campo esparcido hacia atrás y el campo incidente se encuentran en fase, lo cual se confirma de las posiciones de las franjas de interferencia del mapa de campo cercano mostrado

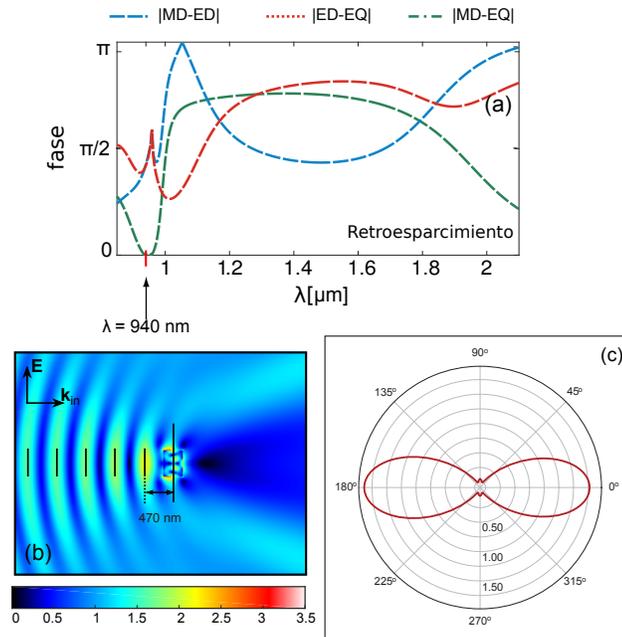


Figura 31. Propiedades del esparcimiento de la partícula rectangular considerada en la figura 30. (a) Fase relativa del esparcimiento hacia atrás de los primeros tres multipolos. (b) Mapa de densidad de la intensidad del campo eléctrico total a $\lambda = 940$ nm. (c) Patrón angular de esparcimiento para el campo lejano a $\lambda = 940$ nm.

en la figura 31-(b). Observamos que el origen de las franjas, o condición de igual fase, coincide con el centro de la partícula. En la figura 31-(c), mostramos la distribución del patrón angular del campo lejano. Es interesante, remarcar que se obtiene un patrón de esparcimiento con dos lóbulos, similar al de la radiación dipolar eléctrica, a pesar de que a esta longitud de onda la excitación del dipolo eléctrico es despreciable. Sin embargo, a diferencia del dipolo eléctrico, los lóbulos observados del campo lejano tienen el mismo signo del campo magnético, ya que vienen de la interferencia constructiva del dipolo magnético y los lóbulos horizontales del cuadrupolo eléctrico. En contraste, los lóbulos verticales del cuadrupolo son suprimidos por la interferencia destructiva con el patrón de radiación dipolar magnética.

Una situación similar ocurre para la partícula cilíndrica en $\lambda = 925$ nm (Figura 32-(a)). Sin embargo, para esta longitud de onda la eficiencia de esparcimiento es muy pequeña, como observamos de la figura 31. Debido a esto, las líneas de interferencia del mapa del campo cercano (Figura 32-(b)), tienen un contraste menor que en el caso de la partícula rectangular. Este resultado también lo observamos de la eficiencia de esparcimiento angular del gráfico 32-(c). Basados en estos argumentos, podemos decir que para el caso de la partícula cilíndrica no esperamos condiciones favorables

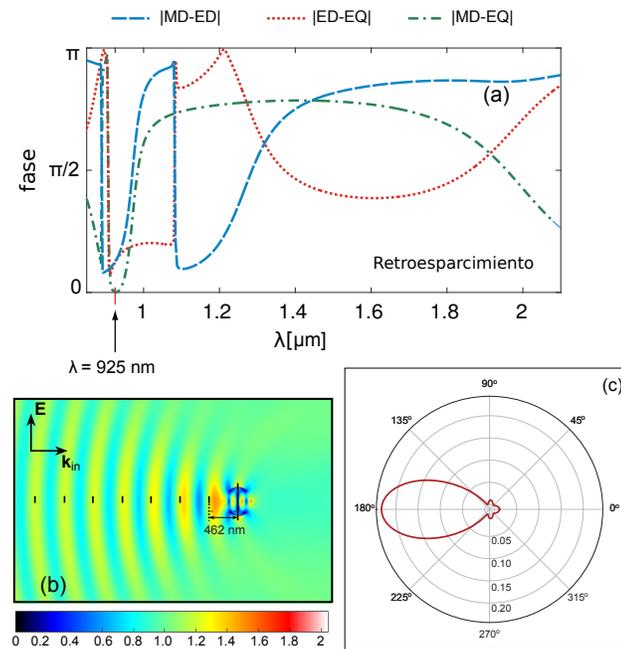


Figura 32. Propiedades del esparcimiento de la partícula cilíndrica considerada en la figura 30. (a) Fase relativa del esparcimiento hacia atrás de los primeros tres multipolos. (b) Mapa de densidad de la intensidad del campo eléctrico total a $\lambda = 925$ nm. (c) Patrón angular de esparcimiento para el campo lejano a $\lambda = 925$ nm.

para construir un espejo alta reflectividad en la región espectral cercana a 925 nm.

El análisis de una partícula nos provee un punto de partida para el diseño del espejo magnético. Con base a los resultados anteriores, nos concentraremos en el caso de partículas rectangulares con dimensiones 420 nm \times 316 nm y periodo de $\Lambda = 576$ nm. Para los siguientes cálculos de esta sección se empleó un programa basado en el método de las diferencias finitas en el dominio del tiempo (Yee, 1966). En la figura 33, presentamos mapas de la intensidad del campo eléctrico, para el caso de dos y cuatro rectángulos para $\lambda = 904$ nm. De la posición y periodicidad de las franjas de interferencia, observamos que la condición de igual fase se sigue cumpliendo en el centro de la partícula. Lo anterior puede interpretarse como una consecuencia de que la partícula aislada no esparce lateralmente (Figura 31-(c)), por lo que se reducen los efectos de interacción.

5.3.2. Estructura periódica

Ahora consideramos el caso de un arreglo infinito formado por los rectángulos estudiados anteriormente. En la figura 34-(arriba), presentamos la reflectividad y la fase relativa para este arreglo. Como esperábamos, la reflectividad es muy alta en la región

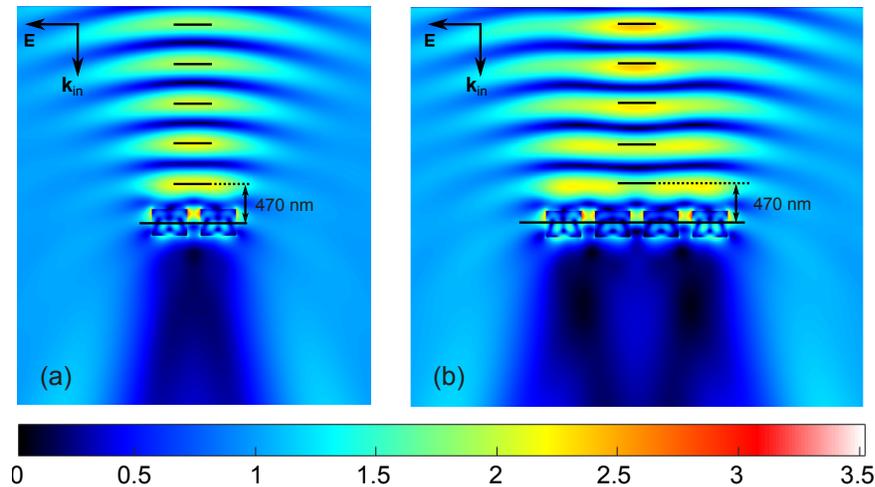


Figura 33. Mapa de la intensidad del campo eléctrico total para (a) dos y (b) cuatro partículas rectangulares como las consideradas en la figura 30 a $\lambda = 940$ nm. La distancia entre los centros de los rectángulos es de 576 nm.

de interés y observamos que para $\lambda = 940$ nm la diferencia de fase entre los campos eléctricos incidente y reflejado es cero, por lo que a esta longitud de onda tenemos la condición de un espejo magnético. Esto, contrasta con el caso de un arreglo periódico de cilindros (Figura 34-abajo), que como ya se había previsto por las propiedades de partícula en la zona de interés, tiene una reflectividad muy baja y no puede considerarse como un espejo.

Para la construcción del espejo magnético, iniciamos con el análisis de una sola partícula rectangular, considerando que las propiedades de partícula podrían heredarse al arreglo periódico. Si esta suposición se cumple, el efecto del espejo magnético mostrado no debería depender de la periodicidad del arreglo. Para comprobar esto, en la figura 35 presentamos la evolución de la reflectividad y la fase como función del periodo de la rejilla y la longitud de onda del campo incidente. Observamos del gráfico-(a), que cuando el periodo es $\approx 0.55 \mu\text{m}$, la reflectividad es muy alta para una zona grande de las longitudes de onda. Para el mapa de fase (b), observamos que la condición de fase cero se cumple de manera independiente del periodo. Esto demuestra que el acoplamiento parece no ser muy relevante y que el resultado se debe a una propiedad de partícula aislada que se preservó. Por otro lado, para $\lambda \approx 1.24 \mu\text{m}$ y $0.4 \mu\text{m} \leq \Lambda \leq 0.65 \mu\text{m}$, se tiene un espejo con reflectividad alta en donde la diferencia de fase entre el campo incidente y reflejado es de π . Es decir, observamos que se comporta como un espejo convencional.

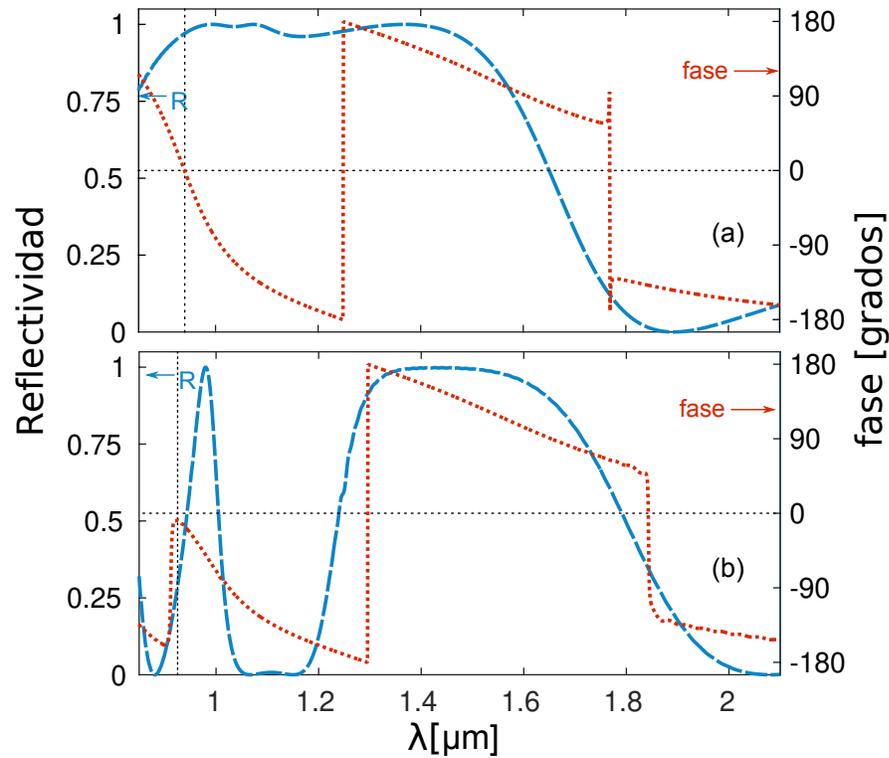


Figura 34. Reflectividad (línea punteada azul) y fase relativa de la onda reflejada (línea punteada roja) para un arreglo infinito de partículas con sección transversal (a) rectangular de $420 \text{ nm} \times 316 \text{ nm}$ y (b) cilíndrica de diámetro de 420 nm . El periodo en ambos casos es de $\Lambda = 576 \text{ nm}$.

Para superficies, usualmente se desea tener la condición de diferencia de fase igual a cero arriba de las partículas y no en el centro. Si tomamos como referencia la parte de arriba de las partículas, se esperaría simplemente un corrimiento lateral del mapa de fase, lo cual se confirma del mapa de fase de la figura 35-(c). Es también interesante que la condición de diferencia de fase cero en la parte de arriba de las partículas coincide con otra región de alta reflectividad y que, en particular, para $\Lambda = 0.576 \mu\text{m}$ y $\lambda = 1.064 \mu\text{m}$, uno recupera nuevamente la condición de espejo magnético.

Para ilustrar los resultados anteriores, específicamente, la condición de espejo magnético con referencia en el centro o en la parte de arriba de la partícula, en la figura 36 presentamos mapas del campo cercano total para (a) $\lambda = 940 \text{ nm}$ y (b) $\lambda = 1064 \text{ nm}$. En cada caso comparamos con el campo total que se tiene por la reflexión de un espejo de oro. La idea es ilustrar que las líneas de interferencia están en antifase con respecto a las del espejo magnético. También, que en el caso del espejo de oro al intensidad es casi cero cerca de la superficie. Los resultados anteriores confirman la posibilidad de crear un espejo magnético con referencia en el centro o en la parte de arriba de las partículas.

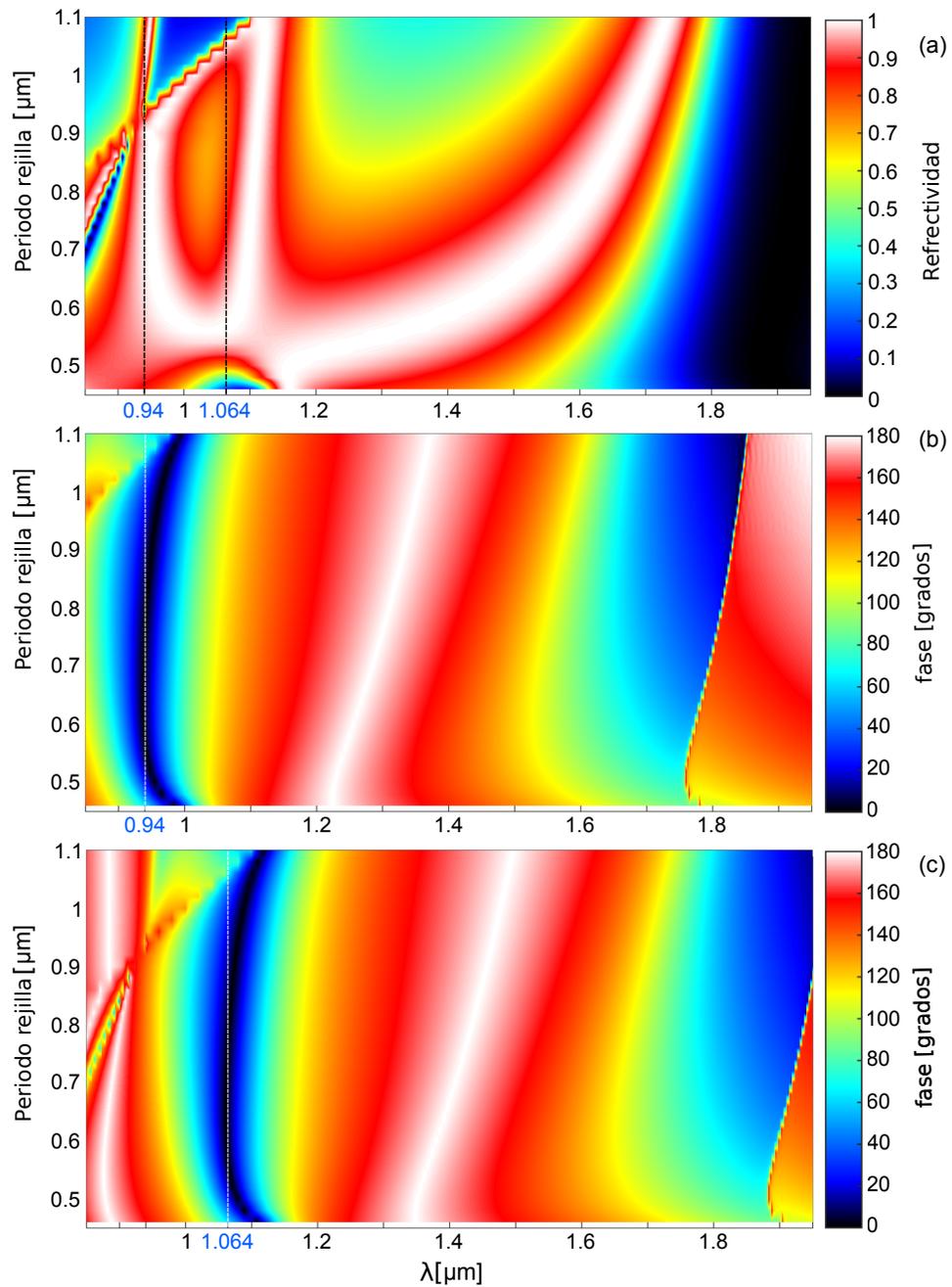


Figura 35. Reflectividad y diferencia de fase entre el campo incidente y reflejado para la estructura periódica de rectángulos como función de el periodo y la longitud de onda. (a) Reflectividad, (b) diferencia de fase tomando como referencia el centro de las partículas, y (c) diferencia de fase tomando como referencia la parte de arriba de las partículas.

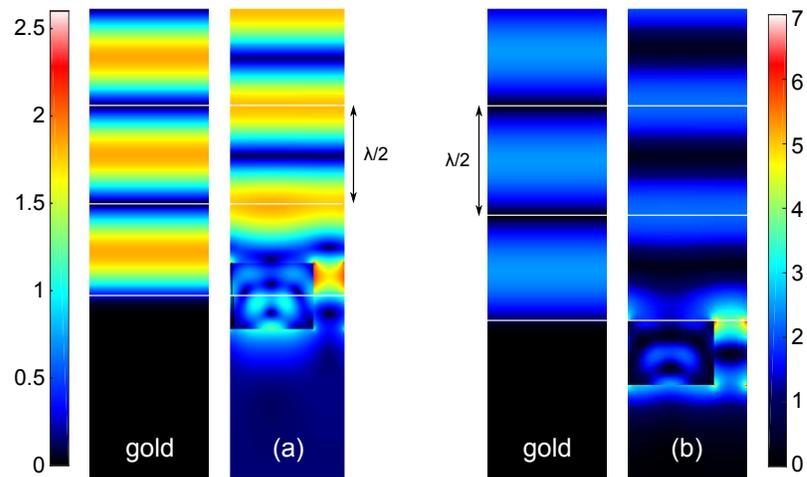


Figura 36. Intensidad del campo eléctrico total en reflexión de una onda plana por un arreglo infinito de partículas rectangulares comparado con un espejo de oro. (a) $\lambda = 940$ nm y $\lambda = 1064$ nm. El periodo de la rejilla es de $\Lambda = 0.576 \mu\text{m}$ y las partículas tienen dimensiones de $420 \text{ nm} \times 316 \text{ nm}$.

Resumiendo, en este capítulo hemos presentado un método para estudiar el campo esparcido en términos de sus contribuciones multipolares. El método se desarrolló tanto para el caso de tres como para el de dos dimensiones. En particular, la teoría del caso 2D fue empleada en un problema específico, que consiste del diseño de espejos magnéticos constituidos por una rejilla dieléctrica sublongitud de onda. El resultado es muy interesante, pues muestra que existen propiedades ópticas de una sola partícula que se pueden heredar al arreglo periódico.

En el siguiente capítulo también emplearemos las técnicas de descomposición multipolar 2D, pero para el caso de un problema de óptica no lineal. Específicamente, para el estudio de la generación de segundo armónico por partículas centrosimétricas.

Capítulo 6. Descomposición multipolar del segundo armónico

En este capítulo estudiamos la generación de segundo armónico (GSA) producido por partículas 2D centrosimétricas hechas de un material de alto índice de refracción. Calculamos los campos a la frecuencia fundamental y del segundo armónico, y empleamos la descomposición multipolar para estudiar los multipolos excitados en las partículas. Esto nos permite estudiar la excitación de los multipolos a la frecuencia del segundo armónico y analizar el efecto de los multipolos excitados en ω en los de 2ω .

El capítulo se estructura de la siguiente manera, primero introducimos la forma de la polarización no lineal para medios isotrópicos utilizada y las fuentes no lineales para los casos de polarización p y s . Las fuentes no lineales se expresan en términos de susceptibilidades no lineales que dependen de la respuesta de bulto y de la superficie. Después, presentamos un modelo simple que nos permite describir las susceptibilidades de segundo orden para dieléctricos de sistemas centrosimétricos en función de la respuesta lineal. Por facilidad en la derivación del modelo y la representación de las cantidades no lineales, en este capítulo empleamos unidades cgs. Sin embargo, los resultados del segundo armónico están normalizados y expresados de la manera usual, en unidades de área por unidad de potencia (cm^2/Watt), como mostraremos más adelante. Para validar los resultados numéricos, realizamos comparaciones con los resultados analíticos para la generación de segundo armónico por cilindros infinitos (Valencia *et al.*, 2004); en el apéndice E presentamos los principales resultados analíticos de dicho artículo.

Con estos antecedentes, demostramos con argumentos de simetría que para partículas de medios centrosimétricos que poseen simetría con respecto a un eje paralelo a la dirección de incidencia, no es posible excitar un dipolo magnético a la frecuencia del segundo armónico. El resultado anterior se ilustra al calcular el esparcimiento para partículas con secciones transversales circulares, cuadradas y triangulares. Asimismo, presentamos cálculos numéricos que ilustran los efectos de los multipolos a la frecuencia fundamental en los multipolos del segundo armónico. Los resultados más importantes de este capítulo se reportaron en (Mandujano *et al.*, 2019).

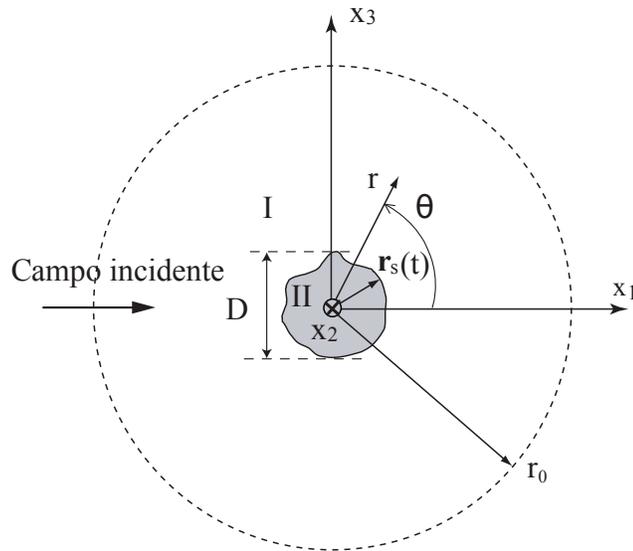


Figura 37. Situación física y geometría del problema.

6.1. Métodos teóricos

La situación física considerada se ilustra en la figura 37. Una partícula 2D definida por la frontera entre el vacío (medio I) y un material no lineal (II), se ilumina en polarización p o s por una onda plana monocromática que se propaga en la dirección del eje x_1 .

Suponemos que el medio II es isotrópico, homogéneo, no magnético y que está caracterizado por su permitividad $\epsilon(\omega)$. También suponemos que la partícula es invariante en la dirección de x_2 y que su perfil puede describirse en términos de dos funciones que dependen de un parámetro t . Estas funciones representan las coordenadas x_1 y x_3 , esto es

$$\mathbf{r}_s(t) = [\xi(t), \eta(t)]. \quad (125)$$

Las formas de partícula utilizados en este capítulo fueron generadas numéricamente con la superfórmula de Gielis (Gielis, 2003).

6.1.1. Fuentes no lineales en la GSA

El problema de la GSA considerado depende de la solución del problema lineal y de las no linealidades del medio que son representadas por la polarización no lineal. La forma más general de la polarización no lineal para un medio isotrópico es (Bloember-

gen et al., 1968)

$$\mathbf{P}^{NL}(\mathbf{r}, 2\omega) = \alpha[\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \nabla] \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \beta \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) [\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)] + \gamma \nabla [\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)], \quad (126)$$

donde $\alpha = \delta - \beta - 2\gamma$ y las constantes δ , β y γ son parámetros que dependen de la frecuencia y caracterizan la respuesta no linealidad de bulto para un medio.

Las condiciones de frontera para el segundo armónico pueden escribirse de manera general para iluminación s o p de la forma (Valencia et al., 2003)

$$\psi_{s,p}^{(I)}(t, 2\omega) - \psi_{s,p}^{(II)}(t, 2\omega) = A_{s,p}(t, 2\omega), \quad (127)$$

$$\gamma_{s,p}^{(I)}(t, 2\omega) - \frac{1}{\nu_{s,p}(2\omega)} \gamma_{s,p}^{(II)}(t, 2\omega) = B_{s,p}(t, 2\omega), \quad (128)$$

donde $\nu_s(2\omega) = 1$, $\nu_p(2\omega) = \epsilon(2\omega)$, $\psi_{s,p}^{(I),(II)}(t, 2\omega)$ representa el campo que se encuentre en la dirección de la coordenada x_2 (campo magnético para p y eléctrico para s), y $\gamma_{s,p}^{(I),(II)}(t, 2\omega)$ representa la derivada normal del campo. En estas expresiones, tanto el campo como su derivada normal están evaluados en la superficie.

De lo anterior, las fuentes no lineales son (Valencia et al., 2003)

$$A_s(t|2\omega) = 0, \quad (129)$$

$$B_s(t|2\omega) = -16\pi i \frac{\omega}{c} \chi_{\parallel\parallel\perp} \psi_s^{(I)}(t|\omega) \frac{d\psi_p^{(I)}(t|\omega)}{dt}, \quad (130)$$

$$A_p(t|2\omega) = 8\pi i \frac{c}{\omega} \frac{\chi_{\parallel\parallel\perp}}{\phi^2(t)} \gamma_p^{(I)}(t|\omega) \frac{d\psi_p^{(I)}(t|\omega)}{dt}, \quad (131)$$

$$B_p(t|2\omega) = 8\pi i \frac{c}{\omega} \left\{ \chi_{\perp\perp\perp} \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{\phi(t)} \frac{d\psi_p^{(I)}(t|\omega)}{dt} \right]^2 + \chi_{\perp\parallel\parallel} \frac{d}{dt} \left[\frac{\gamma_p^{(I)}(t|\omega)}{\phi(\omega)} \right]^2 + \chi_b \frac{d}{dt} [\psi_p^{(I)}(t|\omega)]^2 \right\} - 8\pi i \frac{\omega}{c} \left\{ \eta_{\perp\parallel\parallel} \frac{d}{dt} [\psi_s^{(I)}(t|\omega)] \right\}, \quad (132)$$

donde $\phi(t) = \sqrt{[\eta'(t)]^2 + \xi'(t)]^2}$.

Podemos observar de las fuentes no lineales (129)-(130), que para obtener una señal del segundo armónico tipo s se necesita iluminar con una combinación de señal tipo p y s . En cambio, si se ilumina de manera independiente con una señal tipo p o de tipo s observamos de (131)-(132), que el segundo armónico siempre tendrá polari-

zación tipo p . En este trabajo nos centramos en el caso de que la onda plana incidente sea sólo del tipo p o del tipo s por lo que el segundo armónico obtenido siempre será del tipo p .

Las susceptibilidades de segundo orden que aparecen en las fuentes no lineales están relacionadas a las constantes no lineales de bulo y a los elementos del tensor de segundo orden de la susceptibilidad χ_{ijk}^s (Inchaussandague *et al.*, 2017):

$$\chi_{\parallel\parallel\perp} = \chi_{ttz}^s, \quad (133)$$

$$\chi_{\perp\perp\perp} = \chi_{zzz}^s + \frac{\alpha/2 + \gamma}{\epsilon_{II}(2\omega)\epsilon_{II}^2(\omega)}, \quad (134)$$

$$\chi_{\perp\parallel\parallel} = \chi_{ztt}^s + \frac{\alpha/2 + \gamma}{\epsilon_{II}(2\omega)}, \quad (135)$$

$$\eta_{\perp\parallel\parallel} = \chi_{ztt}^s + \frac{\gamma}{\epsilon_{II}(2\omega)}, \quad (136)$$

$$\chi_b = \frac{\alpha}{2\epsilon_{II}(\omega)\epsilon_{II}(2\omega)} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2, \quad (137)$$

en donde empleamos el resultado que para un medio centrosimétrico sólo existen tres contribuciones no nulas en el tensor de susceptibilidad.

A continuación presentamos un modelo que utilizamos para calcular analíticamente las susceptibilidades de superficie y la respuesta por bulo para dieléctricos centrosimétricos.

6.1.2. Modelo de susceptibilidades no lineales para dieléctricos (dipollium)

El modelo de entidades polarizables o dipollium es un modelo simple que nos permite obtener la respuesta no lineal de segundo orden para dieléctricos de sistemas centrosimétricos en función de la respuesta lineal (Mendoza y Mochán, 1996). El modelo consiste de considerar una distribución homogénea de dipolos que responden armónicamente al campo fundamental.

Para obtener expresiones analíticas de la polarización no lineal, partimos de la ecuación de movimiento que describe la posición de un electrón ligado a un núcleo con frecuencia natural ω_0 que interactúa con un campo electromagnético $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ y $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$:

$$m_0 \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -e\mathbf{E} - m_0 \omega_0^2 \mathbf{x} - m\Gamma \frac{d\mathbf{x}}{dt} - \frac{e}{c} \frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B}, \quad (138)$$

donde m_0 y e son la masa y carga del electrón, \mathbf{x} es el vector de posición del electrón alrededor de su posición de equilibrio \mathbf{r}_0 y Γ es el arrastre debido a efectos que se oponen al movimiento del electrón, el cual es inversamente proporcional al tiempo de relajación.

Consideremos ahora la expansión en serie de Taylor de los campos con respecto a la posición de equilibrio

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{x}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t) + \mathbf{r} \cdot \nabla \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t) + \dots, \quad (139)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{x}, t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}_0, t) + \mathbf{r} \cdot \nabla \mathbf{B}(\mathbf{r}_0, t) + \dots. \quad (140)$$

Los términos de orden superior no contribuyen al proceso de la GSA por lo que sólo consideramos los dos primeros para el desarrollo.

Sustituyendo (139)-(140) en (138) y empleando que los campos poseen dependencia armónica en el tiempo $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \Re\{\mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}\}$ y $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = -c \int dt' \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t')$, la ecuación de movimiento es

$$m_0 \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} \approx -e\mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t) - m_0 \omega_0^2 \mathbf{x} - m_0 \Gamma \frac{d\mathbf{x}}{dt} - e\mathbf{x} \cdot \nabla \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t) + e \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) \times \int dt' [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t')]. \quad (141)$$

Suponiendo que los campos ópticos son usualmente mucho menores que los campos atómicos que mantienen al electrón cerca de su posición de equilibrio. Podemos resolver la ecuación de movimiento con una técnica perturbativa, proponiendo una expansión para la posición de la forma $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}^{(1)}(t) + \mathbf{x}^{(2)}(t) + \dots$, donde las soluciones de orden m son $\mathbf{x}^{(m)}(t) = \Re\{\mathbf{x}_{m\omega} e^{-im\omega t}\}$.

Introduciendo $\mathbf{x}^{(1)}(t)$ en la ecuación de movimiento obtenemos que

$$\mathbf{x}_\omega = \frac{(e/m_0)}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \mathbf{E}_\omega,$$

en donde \mathbf{E}_ω es la componente de Fourier de \mathbf{E} a la frecuencia ω . Empleando que el momento dipolar a la frecuencia ω es $\mathbf{p}_\omega = -e\mathbf{x}_\omega = \chi(\omega)\mathbf{E}_\omega$, podemos indentificar la respuesta lineal como

$$\chi(\omega) = \frac{e^2/m_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega}. \quad (142)$$

Similarmente, obtenemos el dipolo inducido en 2ω resolviendo para $\mathbf{x}_{2\omega}$ en términos de $\chi(\omega)$ y el campo E_ω , y empleando que $\mathbf{p}_{2\omega} = -e\mathbf{x}_{2\omega}$ obtenemos

$$\mathbf{p}_{2\omega} = -\frac{\chi(\omega)\chi(2\omega)}{2e} [\nabla(\mathbf{E}_\omega \cdot \mathbf{E}_\omega) - e\mathbf{E}_\omega \times \nabla \times \mathbf{E}_\omega]. \quad (143)$$

Además de la contribución dipolar, el momento cuadrupolar eléctrico también contribuye a la GSA. Empleando que el cuadrupolo eléctrico es $\bar{\mathbf{Q}}_{2\omega} = -e\mathbf{x}_\omega\mathbf{x}_\omega$ y expresándolo en términos del campo eléctrico tenemos

$$\bar{\mathbf{Q}}_{2\omega} = -\frac{1}{e}\chi^2\mathbf{E}_\omega\mathbf{E}_\omega. \quad (144)$$

Las expresiones (143)-(144) representan la respuesta microscópica de un electrón que podemos utilizar para encontrar la respuesta macroscópica del medio usando (Jackson, 2012):

$$\mathbf{P}^{NL} = n(z)\mathbf{p}_{2\omega} - \frac{1}{2}\nabla \cdot n(z)\bar{\mathbf{Q}}_{2\omega}, \quad (145)$$

donde $n(z)$ es la función de densidad de entidades polarizables del medio.

Sustituyendo los multipolos (143)-(144) en (145), y con un poco de álgebra vectorial obtenemos que

$$\mathbf{P}^{NL} = \frac{n(z)\chi(\omega)}{2e} [\chi(\omega) - 4\chi(2\omega)] (\mathbf{E}_\omega \cdot \nabla)\mathbf{E}_\omega - \frac{\chi(\omega)}{8\pi e} (\nabla \cdot \mathbf{E}_\omega)\mathbf{E}_\omega + \frac{n(z)\chi(\omega)\chi(2\omega)}{2e} \nabla(\mathbf{E}_\omega \cdot \mathbf{E}_\omega). \quad (146)$$

Comparando la ecuación (146) con (126) podemos identificar las constantes α , β y γ como

$$\alpha(\omega) = -\frac{\epsilon(\omega) - 1}{32\pi^2 n_B e} [4\epsilon(2\omega) - \epsilon(\omega) - 3], \quad (147)$$

$$\beta(\omega) = -\frac{\epsilon(\omega) - 1}{32\pi^2 n_B e}, \quad (148)$$

$$\gamma(\omega) = \frac{\epsilon(\omega) - 1}{32\pi^2 n_B e} [\epsilon(2\omega) - 1], \quad (149)$$

donde empleamos que la relación entre la permitividad del medio y la susceptibilidad: $\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi n_B \chi(\omega)$, donde n_B representa la densidad de entidades polarizables.

Para tomar en cuenta las contribuciones de la superficie se necesita integrar las

componentes tangenciales y perpendiculares de la polarización a través de la interfaz, con lo que obtenemos

$$\chi_{zzz}^s(\omega) = -\frac{(\epsilon(\omega) - 1)^2}{32\pi^2 n_B e \epsilon(\omega)^2} \left\{ \frac{2\epsilon(\omega) - \epsilon(2\omega) - \epsilon(\omega)\epsilon(2\omega)}{[\epsilon(2\omega) - \epsilon(\omega)]} + \frac{[1 - \epsilon(2\omega)]}{[\epsilon(2\omega) - \epsilon(\omega)]^2} \ln\left(\frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon(2\omega)}\right) \right\}, \quad (150)$$

$$\chi_{tzt}^s(\omega) = \chi_{tzt}^s(\omega) = \frac{1}{32\pi^2 n_B e} \frac{[\epsilon(\omega) - 1]^2}{\epsilon(\omega)}, \quad (151)$$

$$\chi_{ztt}^s(\omega) = 0. \quad (152)$$

Las constantes no lineales expresadas en las ecuaciones (147)-(152), junto con las ecuaciones para las fuentes no lineales (127) y (128) definen la respuesta no lineal del sistema. Para emplear el modelo en un medio dieléctrico específico, podemos tomar las cantidades n_B , ω_0 y Γ como parámetros libres que se ajustan a los datos experimentales de la función dieléctrica en la región espectral de interés. En particular, para el caso del Si (Palik, 1998), podemos tomar la fuerza del oscilador como $F = 4\pi n_B e^2 / m_0 = 3.65 \times 10^{32} \text{s}^{-2}$, la frecuencia de resonancia $\omega_0 = 5.9 \times 10^{15} \text{s}^{-1}$, y la constante de arrastre $\Gamma = 3.0 \times 10^{14} \text{s}^{-1}$. Con lo anterior, obtenemos un buen ajuste para la función dieléctrica del Si en una zona espectral de $0.4\text{-}3 \mu\text{m}$ (figura 38). De este ajuste estimamos que la densidad de entidades polarizables es $n_B \approx 1.15 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$.

6.1.3. Descomposición del campo esparcido

Para facilitar la descomposición multipolar podemos emplear la expresión del campo esparcido para valores grandes de r en términos de amplitud de esparcimiento tanto para el caso lineal y no lineal como (Valencia *et al.*, 2004)

$$\psi_{sc}^{(l)}(r, \theta | \Omega) = e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{e^{ik_\Omega r}}{\sqrt{8\pi k_\Omega r}} S(\theta | \Omega), \quad (153)$$

donde $k_\Omega = \Omega/c$ y la amplitud de esparcimiento puede calcularse de la forma

$$S(\theta | \Omega) = \int_S \left[ik_\Omega [\eta'(t') \cos \theta - \xi'(t') \sin \theta] \psi_{s,p}^{(l)}(t' | \Omega) - \Upsilon_{s,p}^{(l)}(t' | \Omega) \right] \times \exp\{-ik_\Omega [\xi(t') \cos \theta - \eta(t') \sin \theta]\} dt'. \quad (154)$$

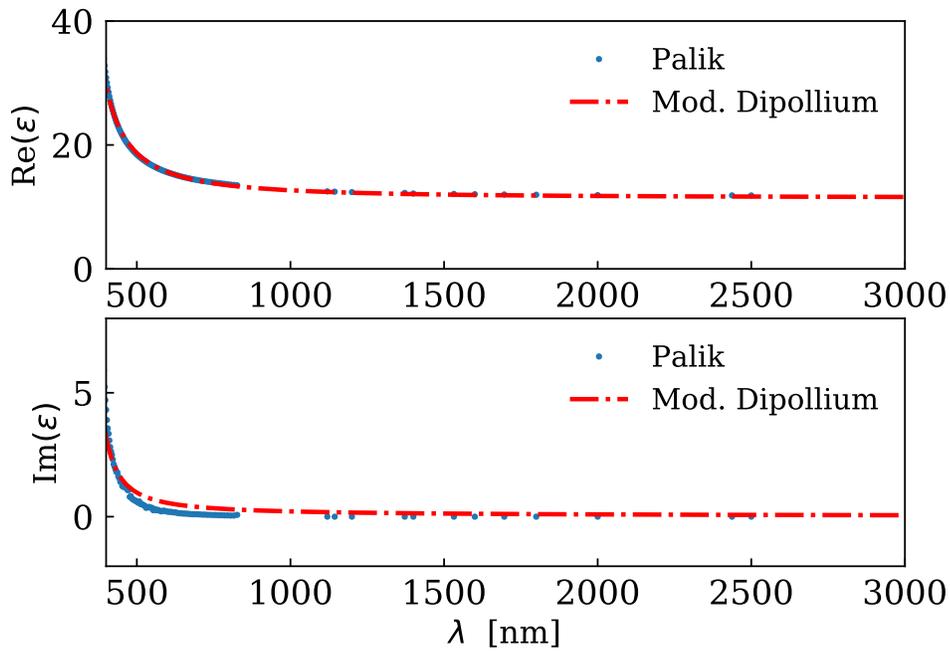


Figura 38. Función dieléctrica del Si, se muestran los datos experimentales de Palik (Palik, 1998) y un ajuste basado en un oscilador con $F = 3.65 \times 10^{32} \text{s}^{-2}$, $\omega_0 = 5.9 \times 10^{15} \text{s}^{-1}$ y $\Gamma = 3.0 \times 10^{14} \text{s}^{-1}$.

Las funciones fuente $\psi_{s,p}^{(I)}(t'|\Omega)$ y $\Upsilon_{s,p}^{(I)}(t'|\Omega)$ se calculan al resolver numéricamente un par de ecuaciones integrales e imponer las condiciones de frontera lineales y no lineales.

Por otro lado, empleando (117) podemos expresar el campo esparcido fuera de un cilindro virtual que envuelve a la partícula como

$$\psi_{sc}^{(I)}(r, \theta|\Omega) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m^+ \psi_m^+(r, \theta|\Omega) + \sum_{m=1}^{\infty} c_m^- \psi_m^-(r, \theta|\Omega), \quad (155)$$

donde para $m \neq 0$

$$\psi_m^{\pm}(r, \theta, |\Omega) = i^m H_m^{(1)}(k_{\Omega} r) \begin{cases} \cos m\theta \\ i \sin m\theta \end{cases},$$

$$c_m^{\pm} = (c_m \pm c_{-m}),$$

y para $m = 0$

$$\psi_0^+(r, \theta, |\Omega) = H_0^{(1)}(k_{\Omega} r),$$

$$c_0^+ = c_0.$$

Sustituyendo la ecuación del campo lejano (153) en la descomposición multipolar (119) podemos calcular los coeficientes multipolares como

$$c_m^\pm = \frac{i}{4\pi} \int_0^{2\pi} S(\theta|\Omega) \begin{Bmatrix} \cos m\theta \\ -i \sin m\theta \end{Bmatrix} d\theta, \quad (156)$$

y para $m = 0$,

$$c_0 = \frac{i}{8\pi} \int_0^{2\pi} S(\theta|\Omega) d\theta. \quad (157)$$

Cuando consideremos el campo a la frecuencia fundamental usaremos a_m^\pm para denotar los coeficientes c_m^\pm y para los coeficientes del segundo armónico usaremos b_m^\pm .

La ecuación (155) pone de manifiesto el hecho de que el campo esparcido $\psi_{sc}^{(l)}(r, \theta|\Omega)$ puede expresarse como una combinación de funciones simétricas $\psi_m^+(r, \theta|\Omega)$ y antisimétricas $\psi_m^-(r, \theta|\Omega)$ con respecto a la dirección de iluminación (Figura 39). Es decir, es una combinación de una base par y una impar, y en general se necesitan ambas contribuciones para describir el campo en su totalidad.

6.1.4. Eficiencia de esparcimiento del segundo armónico

De manera similar al cálculo de la eficiencia lineal, para el cálculo de la eficiencia del segundo armónico consideramos la potencia esparcida que atraviesa un cilindro imaginario de largo L y radio r_0 que encierra a la partícula. Con lo anterior, la eficiencia esparcida en el segundo armónico se define como

$$Q_{sc}(2\omega) = \sigma_g \frac{P_{sc}(2\omega)}{[P_{inc}]^2} = \int_0^{2\pi} q_{sc}(\theta|2\omega), \quad (158)$$

donde $P_{inc}(\omega)$ representa la potencia interceptada por una partícula de sección transversal $\sigma_g = DL$. El diferencial de eficiencia de esparcimiento del segundo armónico esta dado por

$$q_{sc}(\theta|2\omega) = \frac{1}{2\omega D} \frac{|S(\theta|2\omega)|^2}{|\psi_0|^4}, \quad (159)$$

donde ψ_0 es la intensidad del campo incidente.

Similarmente al caso lineal podemos obtener la eficiencia de esparcimiento en 2ω

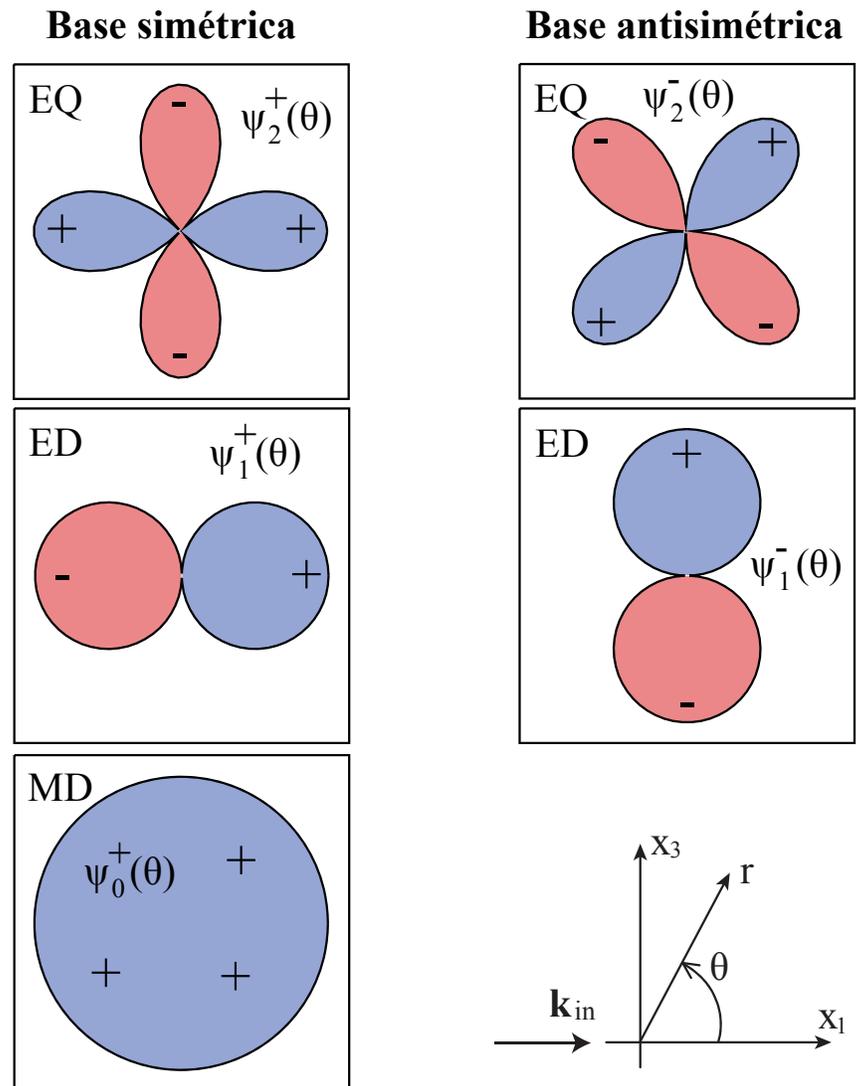


Figura 39. Ilustración de los primeros multipolos simétricos y antisimétricos con respecto a la dirección de iluminación.

en términos de los coeficientes del segundo armónico como

$$Q_{sc}(2\omega) = \frac{8\pi}{\omega D |\psi_0|^4} \left[|b_0|^2 + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} [|b_m^+|^2 + |b_m^-|^2] \right], \quad (160)$$

y la eficiencia diferencial del segundo armónico es

$$q_{sc}(\theta|2\omega) = \frac{16}{\omega D |\psi_0|^4} \left| b_0 + \sum_{m=1}^{\infty} [b_m^+ \cos m\theta + i b_m^- \sin m\theta] \right|^2. \quad (161)$$

En contraste con el caso lineal en el que la eficiencia es adimensional, la eficiencia del segundo armónico por definición tiene unidades de área entre potencia (cm^2/Watt). También, como mencionamos anteriormente, la luz esparcida en el segundo armónico obtenida siempre tendrá polarización p .

6.2. GSA por partículas simétricas

Con referencia a la figura 37, diremos que una partícula es simétrica si tiene simetría con respecto al plano x_1 - x_2 . Es claro que para este tipo de partículas $\psi_{sc}^{(I)}(r, \theta|\omega) = \psi_{sc}^{(I)}(r, 2\pi - \theta|\omega)$, lo que implica que, por simetría, los coeficientes $\alpha_m^- = 0$. Es decir, que sólo se necesita la base $\psi_m^+(r, \theta|\omega)$ para representar el campo esparcido a la frecuencia fundamental.

Similarmente, el campo esparcido en el segundo armónico es antisimétrico con respecto a la dirección de incidencia. Esto se puede deducir a través de las expresiones de las fuentes no lineales (131)-(132) o, de manera más sencilla, empleando argumentos físicos y de simetría. Para esto, supongamos momentáneamente que para algún tiempo t el campo esparcido en 2ω es simétrico con respecto al plano x_1 - x_2 (ver la Figura 40-a)). Si analizamos la situación física medio ciclo después, al tiempo $t + \tau/2$ para la frecuencia ω (un ciclo a 2ω), observamos (parte de abajo de la figura 40-a)) que el signo del campo en ω ha cambiado, mientras que el signo del campo a 2ω permanece igual. Si para esta situación física realizamos una inversión con respecto al plano x_1 - x_2 , terminamos con una situación física que es diferente a la inicial ya que el signo del campo en 2ω será diferente del asumido originalmente. Esto significa que la suposición de que el campo esparcido a 2ω es simétrico nos lleva a una situación

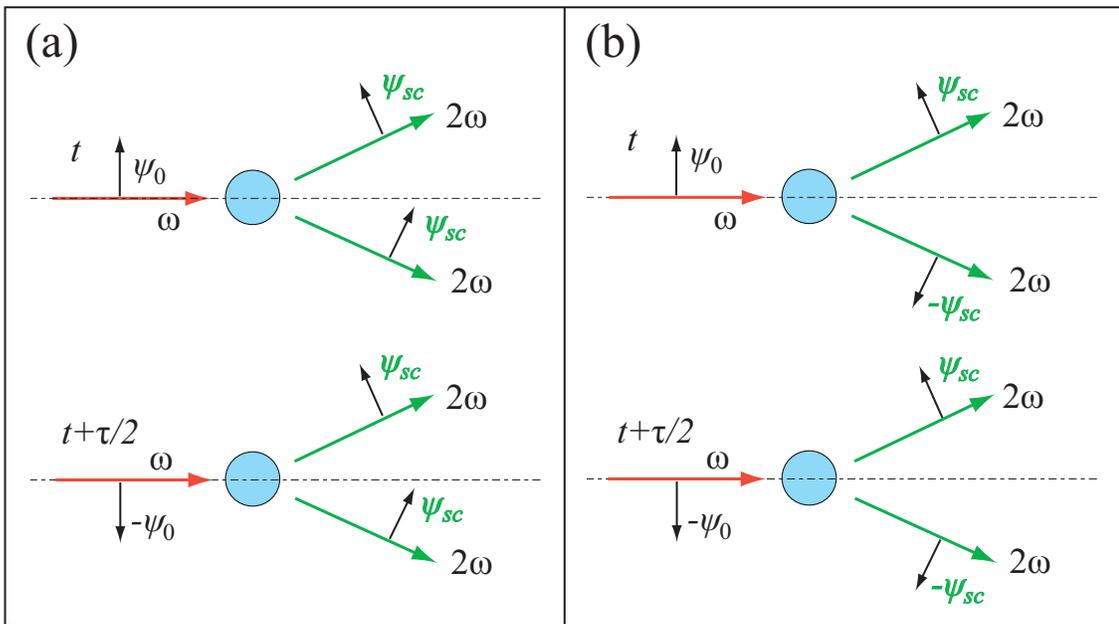


Figura 40. Ilustración de situaciones en donde el campo esparcido en el segundo armónico se asume a) simétrico y b) antisimétrico.

contradictoria. Por otro lado, si consideramos que el campo es antisimétrico (Figura 40-(b)), los mismos argumentos nos llevan a una situación física igual a la asumida originalmente.

Lo anterior demuestra que el campo en 2ω es antisimétrico ($\psi_{sc}^{(l)}(r, \theta|\omega) = -\psi_{sc}^{(l)}(r, 2\pi - \theta|\omega)$) y por lo tanto, que $b_m^+ = 0$, por lo que sólo se necesita la base $\psi_m^-(r, \theta|\omega)$ para representar el campo esparcido a 2ω . Una conclusión inmediata es que para partículas simétricas el coeficiente $b_0^+ = 0$, y por lo tanto, no se puede excitar un dipolo magnético a 2ω . Además, las contribuciones del campo de la base impar son de la forma $b_m^- \sin m\theta$, por lo que no existe radiación en la dirección frontal o hacia atrás ($\theta = 0^\circ$ y $\theta = 180^\circ$).

Como un ejemplo particular que ilustra lo anterior, presentamos a continuación la GSA por una partícula de Si con sección transversal circular de radio $a = 150$ nm. El rango espectral de iluminación es de 800 a 3000 nm, por lo que el segundo armónico cubre el visible y el infrarrojo cercano, de 400 a 1500 nm. Supondremos que la onda incidente tiene polarización tipo p .

En la figura 41, mostramos la eficiencia de esparcimiento para el caso lineal y la de los tres primeros multipolos excitados. Debido a la simetría de la partícula sólo se excitan multipolos de la base $\psi_m^+(r, \theta|\omega)$. De las contribuciones multipolares, observa-

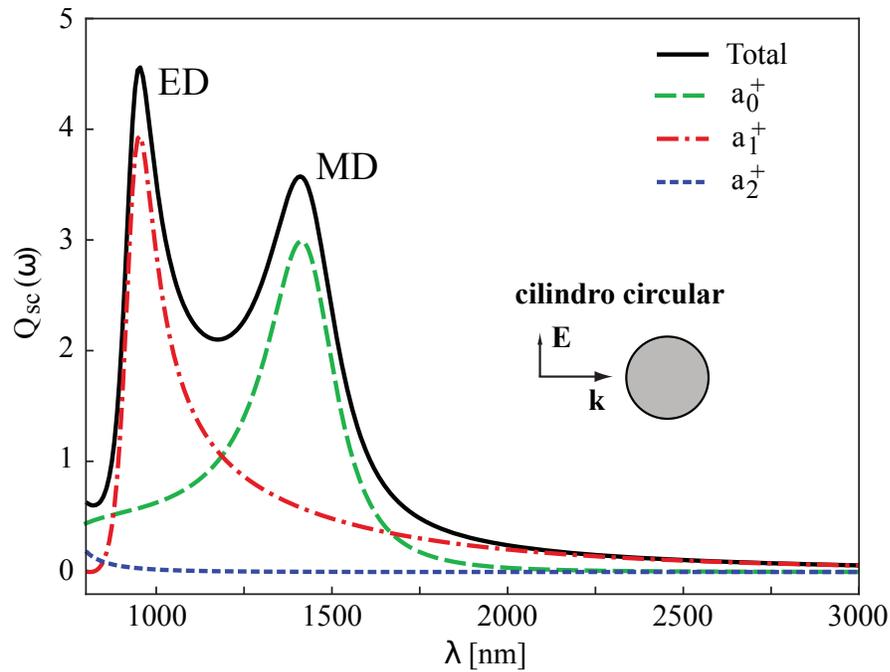


Figura 41. Eficiencia esparcida a la frecuencia fundamental para un cilindro infinito de radio 150 nm. Se muestran las contribuciones de los primeros tres multipolos excitados. Debido a la simetría sólo se excitan multipolos de la base par.

mos que: el dipolo magnético (línea punteada verde) tiene una resonancia intensa en $\lambda = 1403$ nm, el dipolo eléctrico (línea con puntos roja) tiene una resonancia intensa en $\lambda = 977$ nm, y el cuadrupolo eléctrico tiene una contribución pequeña en la región estudiada.

Para estas longitudes de onda de incidencia, calculamos la eficiencia del segundo armónico y las contribuciones multipolares en 2ω , que presentamos en la figura 42-(a). Para facilitar la interpretación de los resultados, en la figura 42-(b), mostramos la eficiencia de esparcimiento del caso lineal y sus primeras cuatro contribuciones multipolares. Esta figura ayuda a identificar los tipos de multipolos que soporta la partícula en este rango de longitudes de onda, así como la posición de sus resonancias. Del caso lineal observamos que los tres primeros multipolos de la base se excitan bastante bien, por lo que resulta claro que el sistema soporta estos tres modos; dipolo magnético, dipolo eléctrico y cuadrupolo eléctrico. En particular, el término a_3^+ se excita muy débilmente, pero tiene una resonancia alrededor de $\lambda = 600$ nm, que de alguna manera conduce a una respuesta relativamente fuerte en los resultados del segundo armónico (término proporcional a b_3^-).

Como mostramos anteriormente para partículas simétricas, no observamos contri-

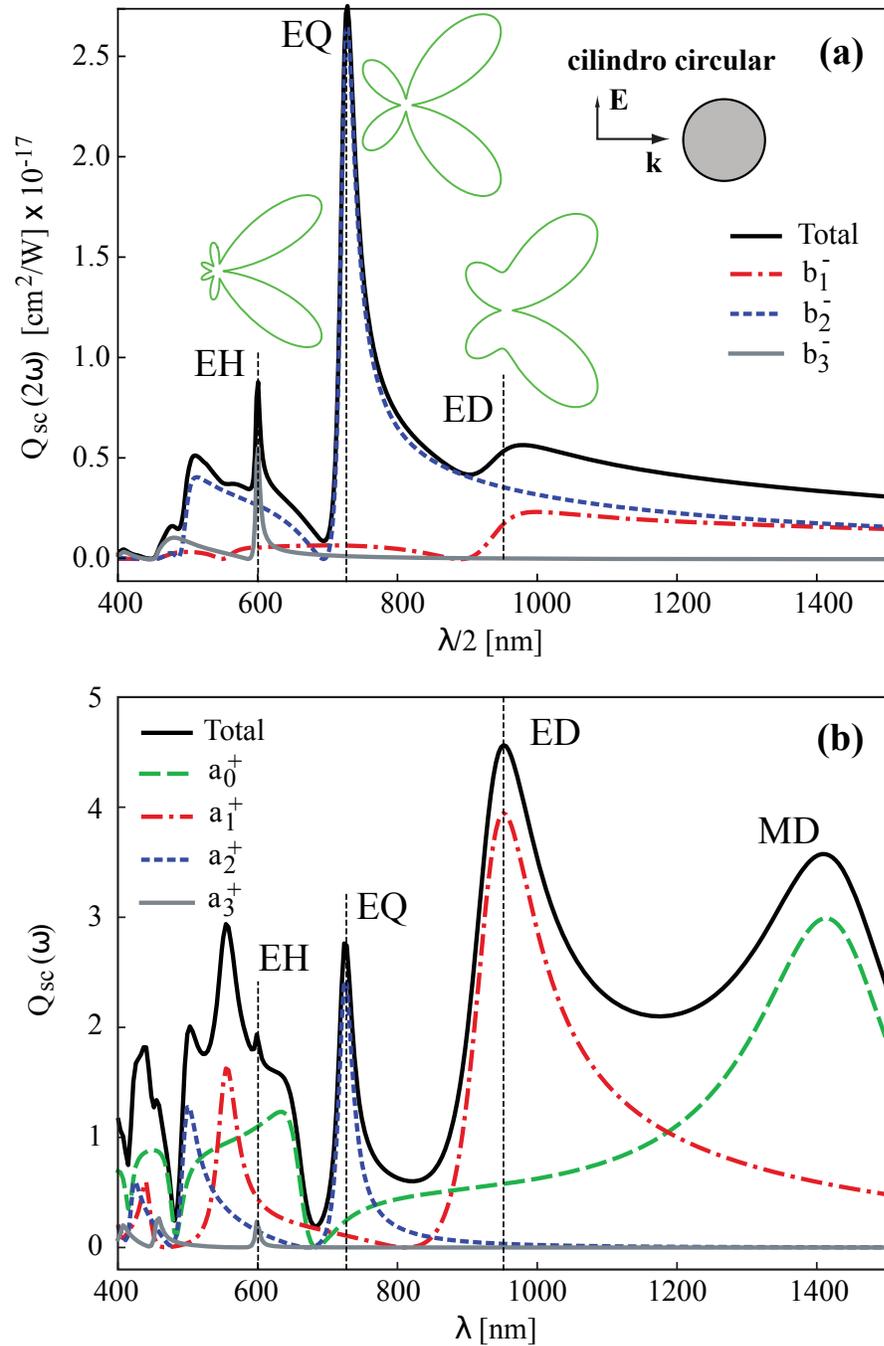


Figura 42. Eficiencia de esparcimiento (a) no lineal y (b) lineal para el cilindro considerado en la figura 41. Para la GSA sólo se excitan multipolos de la base impar, mientras para el caso lineal de la base par. Se ilustra para el caso no lineal el patrón angular en las resonancias multipolares.

buciones del dipolo magnético a la GSA (término proporcional a b_0), ya que sólo se excitan multipolos de la base antisimétrica. Vemos entonces que a pesar de que el sistema soporta una fuerte resonancia dipolar magnética alrededor de $\lambda = 1403$ nm las fuentes del segundo armónico no son capaces de excitarla. Por otro lado, la partícula también tiene una resonancia dipolar eléctrica en $\lambda = 977$ nm (proporcional al término b_1^-), pero esta resonancia no se excita fuertemente en el segundo armónico y es opacada por la contribución del cuadrupolo eléctrico (línea azul punteada, coeficiente proporcional a b_2^-). Esto también se aprecia en la forma del patrón de radiación.

En la figura 43, mostramos un mapa del módulo del campo magnético cercano a la longitud de onda de $\lambda/2 = 977$ nm, que coincide con la resonancia dipolar eléctrica a la frecuencia fundamental. Observamos que incluso a esta longitud de onda el patrón del campo cercano es dominado por el cuadrupolo eléctrico.

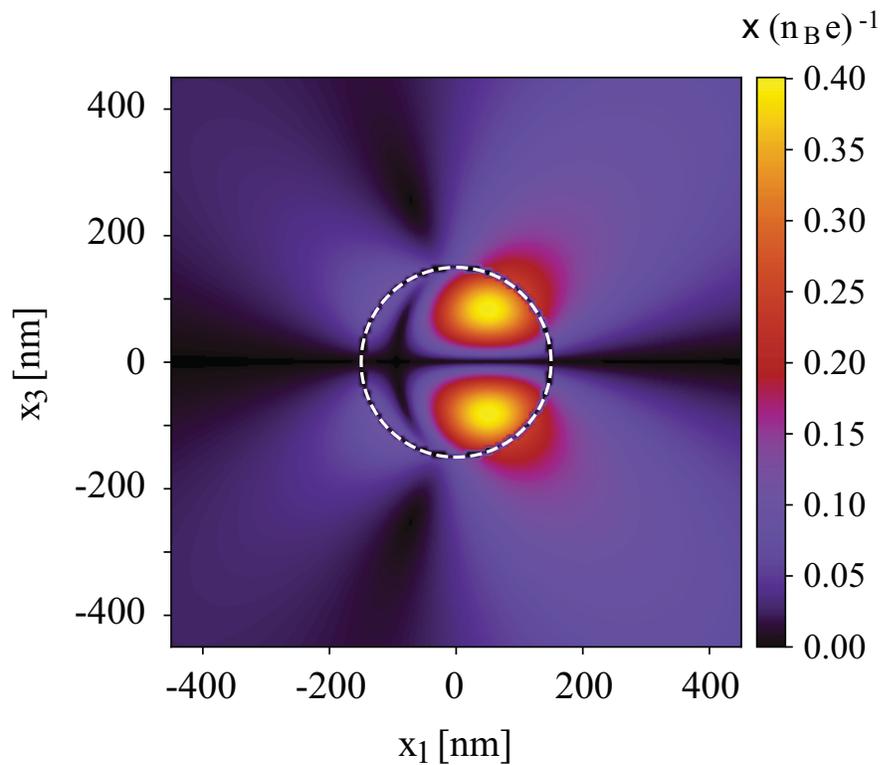


Figura 43. Módulo del campo magnético del segundo armónico para valor máximo del dipolo magnético ($\lambda/2 = 977$ nm) del cilindro considerado en la figura 41. Observamos que incluso en la resonancia de dipolo eléctrico, la contribución que predomina es la del cuadrupolo eléctrico.

6.3. Efecto de los multipolos de la frecuencia fundamental en la GSA

Podemos estudiar el efecto que tienen los multipolos excitados a la frecuencia fundamental en la GSA, empleando la expresión analítica de la eficiencia esparcida en 2ω (Apéndice E). En general, la intensidad de los multipolos excitados en el segundo armónico (b_m^-), depende de las contribuciones multipolares a la frecuencia fundamental (a_m^+), y podemos visualizar el efecto de estos últimos, al apagar y prender determinadas contribuciones multipolares.

Para ilustrar el procedimiento y estudiar dichos efectos, consideramos la misma partícula cilíndrica de silicio de radio $a = 150$ nm del ejemplo anterior. En la figura 44, mostramos la eficiencia del segundo armónico, junto con las curvas obtenidas cuando sólo tomamos en cuenta uno o dos de los multipolos excitados a la frecuencia fundamental. La curva con la línea discontinua verde corresponde al caso en el que en el fundamental sólo se mantiene el término dipolar eléctrico (a_1^+). Observamos que esta sola contribución reproduce casi en su totalidad la curva de la eficiencia, y en particular, la fuerte resonancia del cuadrupolo eléctrico en 2ω alrededor de 726 nm. Por otro lado, si conservamos todas las excitaciones, excepto la dipolar eléctrica (curva gris), perdemos prácticamente toda la respuesta del segundo armónico. También, es interesante notar que la interacción no lineal entre las excitaciones dipolar y cuadrupolar eléctricas reproducen picos del segundo armónico que corresponden a las contribuciones b_1^- y b_3^- .

Concluimos de los resultados presentados en estas figuras que, para partículas cilíndricas, la excitación del dipolo magnético en ω no desempeña ningún papel en la generación del segundo armónico y que la resonancia dipolar magnética en 2ω soportada por la partícula no se puede excitar por los procesos no lineales involucrados. Dado que el modo dipolar magnético está asociado con una circulación del campo eléctrico que es tangencial a la superficie del cilindro, esta observación es una consecuencia del hecho de que la susceptibilidad superficial χ_{ztt}^S es cero en el modelo usado para la polarización no lineal.

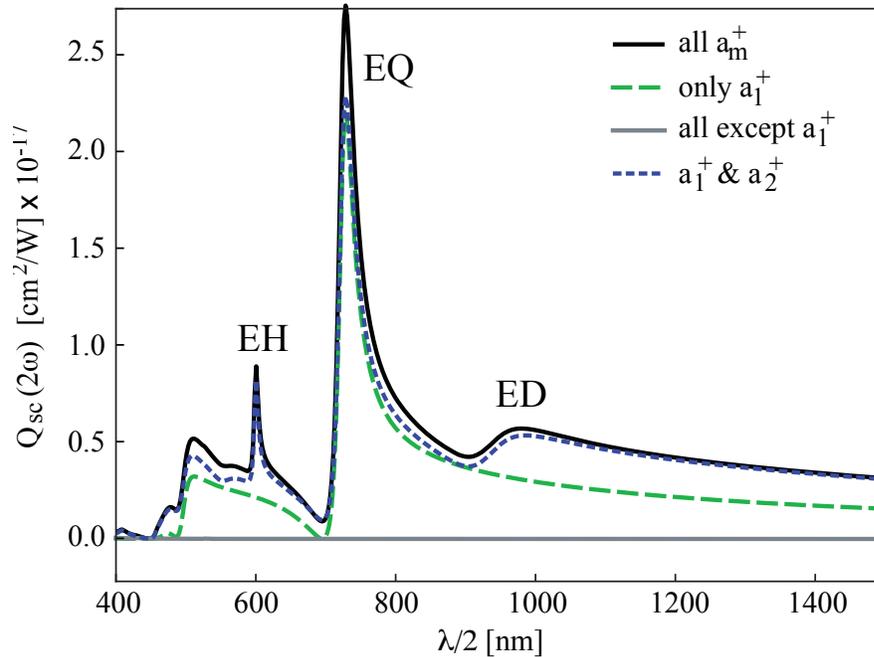


Figura 44. Eficiencia de esparcimiento de la GSA para el cilindro considerado en la figura 41, en donde consideramos los efectos de los multipolos a la frecuencia fundamental. En la línea verde punteada consideramos sólo la contribución dipolar eléctrica, en la línea continua gris consideramos todos los multipolos excepto el dipolar eléctrico, y la línea punteada azul esta dada por las contribuciones del dipolo y cuadrupolo eléctricos.

6.4. Partículas con secciones transversales no circulares

Los resultados presentados hasta ahora corresponden a partículas con una sección transversal circular, para los que se puede proceder mediante las expresiones analíticas de los coeficientes de la expansión multipolar (Valencia *et al.*, 2004). Para partículas con secciones transversales más generales, los campos esparcidos se necesitan calcular numéricamente y, a partir de estos resultados, es posible obtener los coeficientes de la expansión multipolar utilizando la ecuación (156). A continuación, presentamos resultados para partículas con secciones transversales no circulares y discutimos las consecuencias de la ausencia de simetría de la partícula con respecto a la dirección de incidencia.

Consideramos ahora una partícula con una sección transversal cuadrada con esquinas suavizadas y lados $D = 300$ nm. En la figura 45, presentamos los resultados para la eficiencia del segundo armónico. Como esperábamos, sólo se excitan las componentes de la base antisimétrica en el segundo armónico, ya que la partícula es simétrica con respecto al plano x_1 - x_2 . En comparación con el caso del cilindro, observamos que

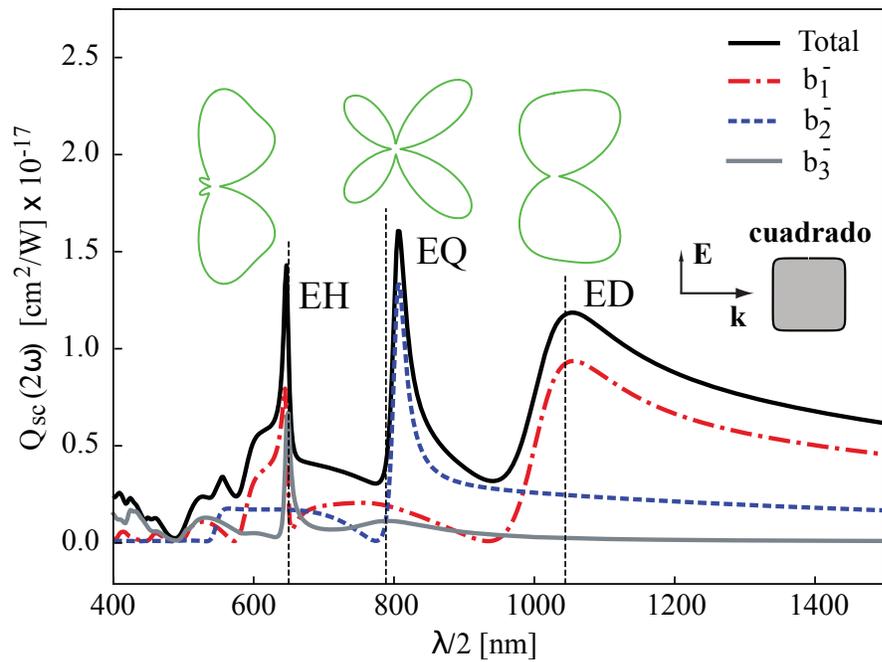


Figura 45. Eficiencia de la GSA para una partícula dieléctrica cuadrada de lado de 300 nm. También se muestran las primeras tres contribuciones multipolares a la eficiencia. Se ilustra el patrón angular de cada resonancia.

la partícula de sección transversal cuadrada tiene una excitación dipolar eléctrica relativamente más fuerte. Podemos apreciar que en su resonancia ($\lambda \sim 1052$ nm), el patrón angular de radiación es de una forma claramente dipolar. Por otro lado, en la resonancia cuadrupolar las otras contribuciones multipolares son insignificantes y, en consecuencia, la distribución angular es claramente de un carácter cuadrupolar.

En la figura 46, mostramos un mapa de densidad del módulo del campo magnético en $\lambda/2 = 1052$ nm, que coincide con el máximo de la excitación dipolar. Como esperábamos del análisis de la eficiencia en 2ω , el patrón de campo cercano es dominado por la contribución dipolar.

Ahora consideramos un partícula que no es simétrica con respecto al plano x_1-x_2 . En esta situación es posible excitar las dos bases multipolares. La sección transversal de la partícula tiene forma de un triángulo equilátero y es iluminada en diferentes orientaciones. Los lados del triángulo tienen una longitud de 285 nm y la iluminación tiene una longitud de onda de $\lambda = 1251$ nm, que se eligió porque coincide con la resonancia cuadrupolar de la partícula a 2ω ($\lambda/2 = 626$ nm).

La situación se ilustra en la figura 47, donde presentamos mapas del modulo del campo magnético cercano con las cuatro orientaciones consideradas. El ángulo α de-

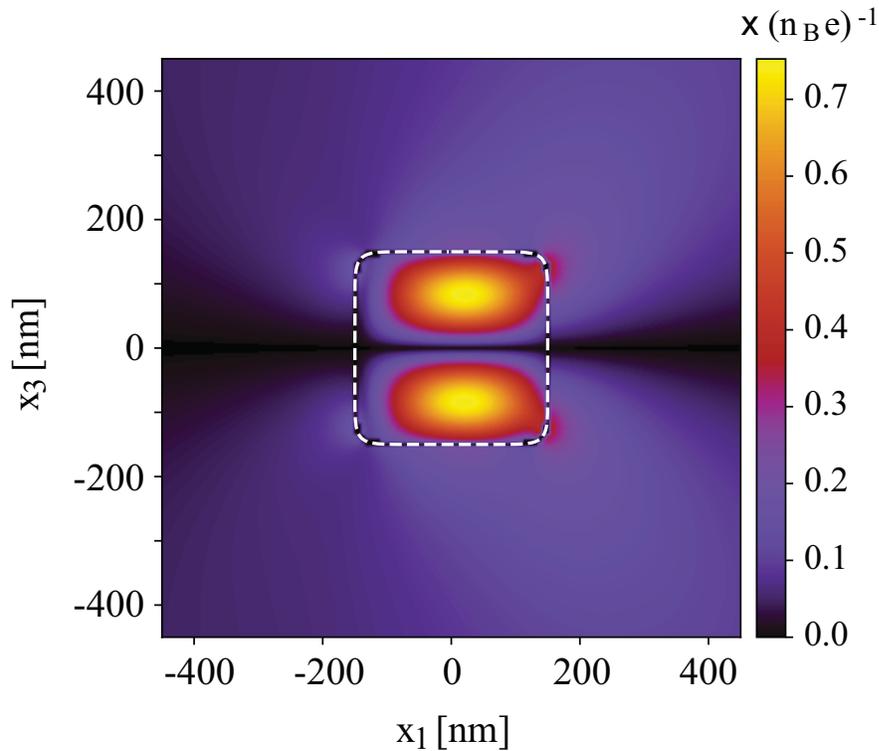


Figura 46. Módulo del campo magnético en el campo cercano de la partícula con sección transversal cuadrada de la figura 45 en $\lambda/2 = 1052$ nm, que coincide con el máximo de la resonancia del dipolo eléctrico a la longitud de onda del segundo armónico.

nota la rotación con respecto a la orientación original, mostrada en (a), la imagen superior izquierda de la figura. Cuando $\alpha = 0^\circ$, la partícula es simétrica con respecto al plano x_1 - x_2 y se espera que solo se excite la base antisimétrica. Como el campo es antisimétrico, su módulo tiene que ser simétrico con respecto al plano x_1 - x_2 , y esta propiedad se puede observar claramente en la figura. Otra forma de verificar la propiedad de antisimetría del campo es calculando los coeficientes de la expansión multipolar, que mostramos en la tabla 3. Observamos que para $\alpha = 0^\circ$, los coeficientes de la base simétrica son idénticamente cero.

Continuando con la discusión de la figura 47-(a), observamos que el mapa del campo cercano coincide muy bien con el que uno esperaría para un campo dominado por una resonancia cuadrupolar, esto coincide con el hecho de que el coeficiente b_2^- sea el más grande, como se muestra en la tabla 3. Lo anterior era de esperarse, ya que escogimos la longitud de onda que coincide con la resonancia del cuadrupolo eléctrico. A medida que giramos la partícula triangular el patrón de campo cercano cambia y, como se observa en la tabla, las contribuciones de la base simétrica dan valores distintos de cero que crecen con el ángulo de rotación. También observamos que el

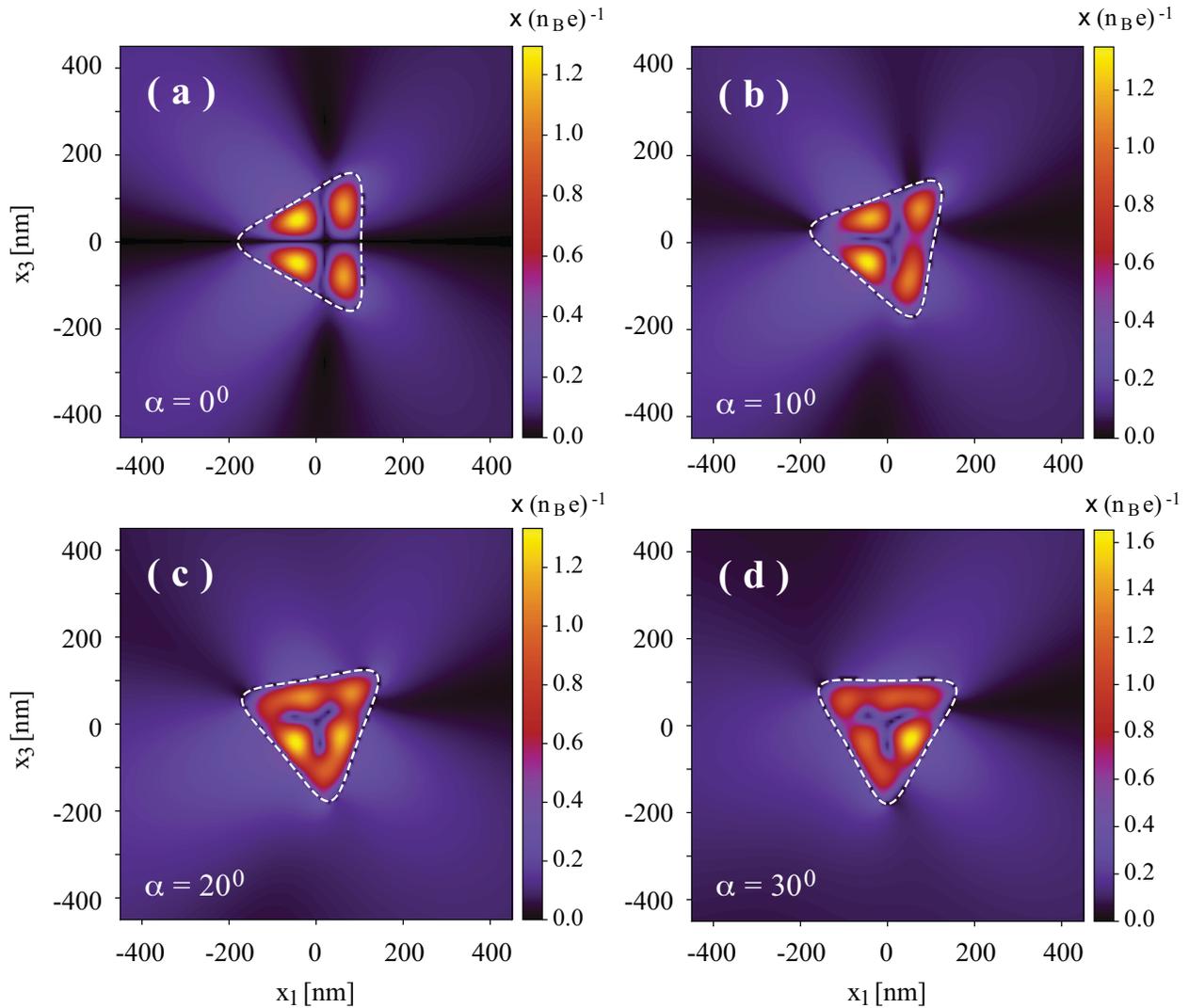


Figura 47. Módulos del campo magnético en el campo cercano de la partícula de sección transversal triangular para diferentes orientaciones a 626 nm, que coincide con la resonancia del cuadrupolo eléctrico. La orientación simétrica de la partícula se muestra (a), mientras (b), (c) y (d) corresponden a rotaciones de 10, 20 y 30 grados.

Tabla 3. Valores de los coeficientes de la expansión multipolar del campo esparcido en el segundo armónico (Figura 47) a $\lambda/2=626$ nm. Por simplicidad, el factor común $1/(n_B e)$ se omitió de los valores mostrados.

α	0°	10°	20°	30°
b_1^+	0.0	-0.089 - 0.034i	-0.154 - 0.056i	-0.177 - 0.066i
b_2^+	0.0	0.106 + 0.112i	0.186 + 0.185i	0.219 + 0.198i
b_3^+	0.0	-0.030 + 0.009i	-0.043 + 0.022i	-0.037 + 0.036i
b_1^-	0.131 - 0.083i	0.120 - 0.062i	0.091 - 0.006i	0.053 + 0.070i
b_2^-	0.088 + 0.347i	0.123 + 0.320i	0.213 + 0.243i	0.321 + 0.136i
b_3^-	-0.003 - 0.097i	-0.002 - 0.090i	0.001 - 0.060i	0.014 - 0.036i

campo a lo largo de la línea $x_3 = 0$ ya no es cero.

Resumiendo, en este capítulo hemos presentado un método para estudiar y analizar la generación del segundo armónico producido por partículas constituidas por medios dieléctricos centrosimétricos. En particular, empleamos la descomposición multipolar para estudiar las resonancias del fundamental y del segundo armónico. Además, estudiamos el efecto que produce la excitación de los multipolos a la frecuencia fundamental en los del segundo armónico. Dentro de los resultados más relevantes presentados se encuentra, la imposibilidad de excitar el dipolo magnético en la GSA para partículas simétricas, lo cual se demostró usando argumentos físicos simples. También, mostramos que es posible sintonizar una resonancia multipolar específica a través de la elección de la geometría de la partícula. Por ejemplo, empleando una partícula de sección transversal cuadrada observamos que ésta poseía una clara resonancia dipolar eléctrica en el segundo armónico, a diferencia de una partícula cilíndrica cuya excitación dipolar es opacada por la cuadrupolar eléctrica en 2ω . Esto resulta interesante, pues permite visualizar un método para realizar ingeniería de modos y, por ende, de la distribución angular de esparcimiento.

En el siguiente capítulo discutiremos los métodos desarrollados en este trabajo y presentaremos las conclusiones generales del mismo. En particular, nos enfocaremos en las principales aportaciones que son las resonancias de Fano en los cilindros dieléctricos finitos, el espejo dieléctrico magnético y la GSA por partículas dieléctricas centrosimétricas.

Capítulo 7. Resumen y conclusiones

En esta tesis hemos abordado problemas de esparcimiento de luz por partículas dieléctricas de alto índice de refracción. De particular interés para nosotros ha sido la excitación del momento dipolar magnético en las partículas, su interacción con otros multipolos y los detalles de su dependencia con la forma de la partícula. Para tratar estos problemas fue necesario desarrollar algunas herramientas teóricas y computacionales. Por un lado, era esencial para el trabajo el desarrollo de técnicas numéricas basadas en ecuaciones integrales de superficie, tanto para el caso 2D como el 3D. Se utilizó también el software del dominio público SCUFF-EM, que es muy eficiente y sirvió para realizar comparaciones con nuestra implementación. Utilizando estas herramientas realizamos cálculos de esparcimiento con partículas de formas distintas a la esfera y el cilindro infinito. Asimismo, desarrollamos un método que nos permitió analizar el campo esparcido en términos de sus contribuciones multipolares, tanto para partículas 2D como 3D. Aunque nos centramos en el caso de partículas dieléctricas, las técnicas desarrolladas son generales y pueden emplearse para otro tipo de problemas, como es el caso del esparcimiento por partículas metálicas.

Empleando el SCUFF-EM, estudiamos problemas de esparcimiento por cilindros dieléctricos finitos, con radios del orden de cien nanómetros y largos del orden de media micra. Nos enfocamos en una región de parámetros que permite combinar las primeras contribuciones multipolares de la solución de Mie para un cilindro infinito con los primeros órdenes de las resonancias de modo guiado de una cavidad Fabry-Perot. Esta combinación da origen a resonancias de Fano estrechas e intensas, que han sido de interés en nanofotónica. La fuerte dependencia de estas resonancias con el entorno, hace susceptible este tipo de sistema para la implementación de varios tipos de sensores.

La descomposición modal fue utilizada para buscar formas de partículas que producen un campo esparcido que está en fase con el campo incidente. Utilizando estos resultados, se propuso el diseño de metasuperficies que consisten de arreglos periódicos de nanopartículas dieléctricas y que se pueden comportar como espejos magnéticos. Para obtener un comportamiento de espejo magnético se requiere, además de una alta reflectividad, que el campo incidente y el reflejado estén en fase sobre la superficie del espejo. Dentro de los resultados más interesantes del trabajo se encuentra

el de que la condición de espejo magnético de metasuperficie se debe a la excitación en fase del dipolo magnético y del cuadrupolo eléctrico en las partículas individuales. Los resultados muestran que, en este caso, las propiedades ópticas de una partícula aislada se heredan a la estructura periódica infinita. De los cálculos de campo cercano se observa también que, al menos aparentemente, el campo dentro de la partícula parece no ser perturbado por la presencia de las partículas vecinas.

También se desarrolló un formalismo para tratar problemas de generación de segundo armónico por partículas dieléctricas de medios centrosimétricos. Para esto, nos enfocamos en el caso del silicio, modelando su respuesta lineal mediante un ajuste basado en un oscilador de Lorentz y, la respuesta no lineal, en términos del modelo conocido como el *Dipollium*. La descomposición modal también fue utilizada para estudiar las contribuciones de las diferentes excitaciones multipolares en la generación de segundo armónico y, por otro lado, para visualizar el tipo de excitaciones que se obtienen a la frecuencia del segundo armónico. Contrario a lo que se sugiere en algunos artículos, nuestro trabajo muestra que para el caso de partículas de materiales centrosimétricos que tienen simetría de inversión con respecto a la dirección de la onda incidente, no es posible excitar la contribución del dipolo magnético del segundo armónico. Asimismo, para el caso del cilindro infinito, mostramos que la contribución del dipolo magnético a la frecuencia fundamental no tiene ningún efecto en la señal de segundo armónico, y que esta se origina en su mayoría por la contribución del dipolo eléctrico a la frecuencia fundamental.

Literatura citada

- Aas, R. Ø. (2012). *Electromagnetic Scattering: a surface integral equation formulation*. Master of Science in Physics and Mathematics. Norwegian University of Science and Technology. 148 pp.
- Abujetas, D. R., Mandujano, M. A., Méndez, E. R., y Sánchez-Gil, J. A. (2017). High-contrast fano resonances in single semiconductor nanorods. *ACS Photonics*, **4**(7): 1814–1821.
- Albella, P., Alcaraz de la Osa, R., Moreno, F., y Maier, S. A. (2014). Electric and magnetic field enhancement with ultralow heat radiation dielectric nanoantennas: considerations for surface-enhanced spectroscopies. *ACS Photonics*, **1**(6): 524–529.
- Balanis, C. A. (2012). *Advanced engineering electromagnetics*. John Wiley & Sons.
- Bharadwaj, P., Deutsch, B., y Novotny, L. (2009). Optical antennas. *AOP*, **1**(3): 438–483.
- Bohren, C. F. y Huffman, D. R. (2008). *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons.
- Cai, W. y Shalaev, V. M. (2010). *Optical metamaterials*, Vol. 10. Springer.
- Caldarola, M., Albella, P., Cortés, E., Rahmani, M., Roschuk, T., Grinblat, G., Oulton, R. F., Bragas, A. V., y Maier, S. A. (2015). Non-plasmonic nanoantennas for surface enhanced spectroscopies with ultra-low heat conversion. *Nat Commun*, **6**: 7915.
- Capolino, F. (2017). *Theory and phenomena of metamaterials*. CRC press.
- Chen-To, T. (1994). *Dyadic green functions in electromagnetic theory*. Intext Educational Publishers.
- Cowper, G. (1973). Gaussian quadrature formulas for triangles. *Int J Numer Methods Eng*, **7**(3): 405–408.
- Decker, M. y Staude, I. (2016). Resonant dielectric nanostructures: a low-loss platform for functional nanophotonics. *J. Opt.*, **18**(10): 103001.
- Fano, U. (1935). Sullo spettro di assorbimento dei gas nobili presso il limite dello spettro d'arco. *Il Nuovo Cimento (1924-1942)*, **12**(3): 154–161.
- Fu, Y. H., Kuznetsov, A. I., Miroshnichenko, A. E., Yu, Y. F., y Luk'yanchuk, B. (2013). Directional visible light scattering by silicon nanoparticles. *Nat Commun*, **4**: 1527.
- García-Etxarri, A., Gómez-Medina, R., Froufe-Pérez, L. S., López, C., Chantada, L., Schefold, F., Aizpurua, J., Nieto-Vesperinas, M., y Sáenz, J. J. (2011). Strong magnetic response of submicron silicon particles in the infrared. *Opt Express*, **19**(6): 4815–4826.
- Geffrin, J.-M., García-Cámara, B., Gómez-Medina, R., Albella, P., Froufe-Pérez, L., Eyraud, C., Litman, A., Vaillon, R., González, F., Nieto-Vesperinas, M., et al. (2012). Magnetic and electric coherence in forward-and back-scattered electromagnetic waves by a single dielectric subwavelength sphere. *Nat Commun*, **3**: 1171.
- Geuzaine, C. y Remacle, J.-F. (2009). Gmsh: A 3-d finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *Int J Numer Methods Eng*, **79**(11): 1309–1331.

- Giannini, V. y Sánchez-Gil, J. A. (2007). Calculations of light scattering from isolated and interacting metallic nanowires of arbitrary cross section by means of green's theorem surface integral equations in parametric form. *JOSA A*, **24**(9): 2822–2830.
- Gibson, W. C. (2007). *The method of moments in electromagnetics*. Chapman and Hall/CRC.
- Gielis, J. (2003). A generic geometric transformation that unifies a wide range of natural and abstract shapes. *Am. J. Bot.*, **90**(3): 333–338.
- González-Alcalde, A. K. (2016). *Estudios de la interacción de luz con superficies rugosas y diseño de elementos ópticos basados en superficies estructuradas*. Tesis de Doctorado en Ciencias en el Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California. 151 pp.
- González-Alcalde, A. K., Mandujano, M. A. G., Salas-Montiel, R., Le cunff, L. O., Lerondel, G., y Méndez, E. R. (en revisión 2019). Magnetic mirror metasurface based on the in-phase excitation of magnetic dipole and electric quadrupole resonances. *JAP*.
- Grahn, P., Shevchenko, A., y Kaivola, M. (2012). Electromagnetic multipole theory for optical nanomaterials. *New J Phys*, **14**(9): 093033.
- Hanninen, I., Taskinen, M., y Sarvas, J. (2006). Singularity subtraction integral formulae for surface integral equations with rwg, rooftop and hybrid basis functions. *PIER*, **63**: 243–278.
- Harrington, R. F. (1993). *Field computation by moment methods*. Wiley-IEEE Press.
- Inchaussandague, M. E., Gigli, M. L., O'Donnell, K. A., Méndez, E. R., Torre, R., y Valencia, C. I. (2017). Second-harmonic generation from plasmon polariton excitation on silver diffraction gratings: comparisons of theory and experiment. *JOSA B*, **34**(1): 27–37.
- Jackson, J. D. (2012). *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons.
- Johnson, B. (1996). Calculation of light scattering from a spherical particle on a surface by the multipole expansion method. *JOSA A*, **13**(2): 326–337.
- Karagodsky, V., Sedgwick, F. G., y Chang-Hasnain, C. J. (2010). Theoretical analysis of subwavelength high contrast grating reflectors. *Opt Express*, **18**(16): 16973–16988.
- Kern, A. (2011). *Realistic modeling of 3D plasmonic systems: A surface integral equation approach*. Tesis de doctorado en École Polytechnique Fédérale de Lausanne. 134 pp.
- Kern, A. M. y Martin, O. J. (2009). Surface integral formulation for 3d simulations of plasmonic and high permittivity nanostructures. *JOSA A*, **26**(4): 732–740.
- Kottmann, J. P. y Martin, O. J. (2000). Accurate solution of the volume integral equation for high-permittivity scatterers. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, **48**(11): 1719–1726.
- Kuznetsov, A. I., Miroshnichenko, A. E., Fu, Y. H., Zhang, J., y Luk'Yanchuk, B. (2012). Magnetic light. *Sci Rep*, **2**: 492.

- Lambert, R. (1978). Complete vector spherical harmonic expansion for maxwell's equations. *AJP*, **46**(8): 849–852.
- Liu, S., Sinclair, M. B., Mahony, T. S., Jun, Y. C., Campione, S., Ginn, J., Bender, D. A., Wendt, J. R., Ihlefeld, J. F., Clem, P. G., *et al.* (2014). Optical magnetic mirrors without metals. *Optica*, **1**(4): 250–256.
- López-Tejeira, F., Paniagua-Domínguez, R., Rodríguez-Oliveros, R., y Sánchez-Gil, J. (2012). Fano-like interference of plasmon resonances at a single rod-shaped nanoantenna. *New J Phys*, **14**(2): 023035.
- Luk'yanchuk, B., Zheludev, N. I., Maier, S. A., Halas, N. J., Nordlander, P., Giessen, H., y Chong, C. T. (2010). The fano resonance in plasmonic nanostructures and metamaterials. *Nat Mater*, **9**(9): 707.
- Magnusson, R. y Shokooh-Saremi, M. (2008). Physical basis for wideband resonant reflectors. *Opt Express*, **16**(5): 3456–3462.
- Maier, S. A. (2007). *Plasmonics: fundamentals and applications*. Springer Science & Business Media.
- Mandujano, M. A., Méndez, E. R., Valencia, C. I., y Mendoza, B. S. (2019). Multipolar analysis of the second harmonic generated by dielectric particles. *Opt Express*, **27**(3): 3337–3353.
- Mateus, C. F., Huang, M. C., Chen, L., Chang-Hasnain, C. J., y Suzuki, Y. (2004). Broadband mirror (1.12-1.62 μm) using a subwavelength grating. *IEEE Photonics Technology Letters*, **16**(7): 1676–1678.
- Mautz, J. R. y Harrington, R. F. (1977). H-field, e-field, and combined field solutions for bodies of revolution. Reporte técnico, Syracuse Univ NY Dept of electrical and computer engineering.
- Medgyesi-Mitschang, L., Putnam, J., y Gedera, M. (1994). Generalized method of moments for three-dimensional penetrable scatterers. *JOSA A*, **11**(4): 1383–1398.
- Mendoza, B. S. y Mochán, W. L. (1996). Exactly solvable model of surface second-harmonic generation. *PHYS REV B*, **53**(8): 4999.
- Mie, G. (1908). Beiträge zur optik trüber medien, speziell kolloidaler metallösungen. *Annalen der physik*, **330**(3): 377–445.
- Miroshnichenko, A. E., Flach, S., y Kivshar, Y. S. (2010). Fano resonances in nanoscale structures. *Rev Mod Phys*, **82**(3): 2257.
- Novotny, L. y Hecht, B. (2006). *Principles of Nano-Optics*. Press Cambridge Univ.
- Novotny, L. y Van Hulst, N. (2011). Antennas for light. *Nat Photonics*, **5**(2): 83.
- Palik, E. D. (1998). *Handbook of optical constants of solids*, Vol. 3. Academic press.
- Paniagua-Dominguez, R., Grzela, G., Rivas, J. G., y Sánchez-Gil, J. A. (2013). Enhanced and directional emission of semiconductor nanowires tailored through leaky/guided modes. *Nanoscale*, **5**(21): 10582–10590.

- Paniagua-Domínguez, R., Yu, Y. F., Miroshnichenko, A. E., Krivitsky, L. A., Fu, Y. H., Valuckas, V., Gonzaga, L., Toh, Y. T., Kay, A. Y. S., Luk'yanchuk, B., *et al.* (2016). Generalized brewster effect in dielectric metasurfaces. *Nat Commun*, **7**: 10362.
- Panofsky, W. K. y Phillips, M. (2005). *Classical electricity and magnetism*. (2nd. ed.) Dover Pub. New York.
- Petschulat, J., Yang, J., Menzel, C., Rockstuhl, C., Chipouline, A., Lalanne, P., Tünnermann, A., Lederer, F., y Pertsch, T. (2010). Understanding the electric and magnetic response of isolated metaatoms by means of a multipolar field decomposition. *Opt Express*, **18**(14): 14454–14466.
- Pryor, R. W. (2009). *Multiphysics modeling using COMSOL®: a first principles approach*. Jones & Bartlett Publishers.
- Rao, S., Wilton, D., y Glisson, A. (1982). Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape. *IEEE Transactions on antennas and propagation*, **30**(3): 409–418.
- Reid, M. H. y Johnson, S. G. (2015). Efficient computation of power, force, and torque in bem scattering calculations. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, **63**(8): 3588–3598.
- Ricciardi, A., Campopiano, S., Cusano, A., Krauss, T. F., y O'Faolain, L. (2010). Broadband mirrors in the near-infrared based on subwavelength gratings in soi. *IEEE Photonics journal*, **2**(5): 696–702.
- Rodríguez-Oliveros, R. y Sánchez-Gil, J. A. (2011). Localized surface-plasmon resonances on single and coupled nanoparticles through surface integral equations for flexible surfaces. *Opt Express*, **19**(13): 12208–12219.
- Sarkar, D. y Halas, N. (1997). General vector basis function solution of maxwell's equations. *PHYS REV E*, **56**(1): 1102.
- Schelkunoff, S. A. (1939). On diffraction and radiation of electromagnetic waves. *Physical Review*, **56**(4): 308.
- Schöberl, J. (1997). Netgen an advancing front 2d/3d-mesh generator based on abstract rules. *Comput Vis Sci*, **1**(1): 41–52.
- Schuller, J. A., Barnard, E. S., Cai, W., Jun, Y. C., White, J. S., y Brongersma, M. L. (2010). Plasmonics for extreme light concentration and manipulation. *Nat Mater*, **9**(3): 193.
- Shcherbakov, M. R., Neshev, D. N., Hopkins, B., Shorokhov, A. S., Staude, I., Melik-Gaykazyan, E. V., Decker, M., Ezhov, A. A., Miroshnichenko, A. E., Brener, I., *et al.* (2014). Enhanced third-harmonic generation in silicon nanoparticles driven by magnetic response. *Nano Lett*, **14**(11): 6488–6492.
- Solis, D. M., Taboada, J. M., Obelleiro, F., Liz-Marzan, L. M., y García de Abajo, F. J. (2014). Toward ultimate nanoplasmonics modeling. *ACS Nano*, **8**(8): 7559–7570.
- Valencia, C. I., Méndez, E. R., y Mendoza, B. S. (2003). Second-harmonic generation in the scattering of light by two-dimensional particles. *JOSA B*, **20**(10): 2150–2161.
- Valencia, C. I., Méndez, E. R., y Mendoza, B. S. (2004). Second-harmonic generation in the scattering of light by an infinite cylinder. *JOSA B*, **21**(1): 36–44.

- Villa, F. V. (2007). Esparcimiento de luz (scattering) por sistemas complejos 3d: método de momento. Notas y códigos de la clase impartido en el Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada.
- Wah, W. H. (1999). Introduction to stl format. *Polytechnical University of Hong Kong*.
- Yee, K. (1966). Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on antennas and propagation*, **14**(3): 302–307.
- Zhao, Q., Zhou, J., Zhang, F., y Lippens, D. (2009). Mie resonance-based dielectric metamaterials. *Mater Today*, **12**(12): 60–69.

Anexo

A. Método de momentos

El método de momentos permite resolver una ecuación con un operador lineal en términos de una ecuación matricial. Para mostrar esto consideremos la siguiente ecuación

$$L(f) = g \quad (162)$$

donde L es un operador lineal, g es una función conocida y f es la función incógnita. En nuestro problema L puede representar los operadores \widehat{D} y \widehat{K} , f puede representar las corrientes equivalentes $\{\mathbf{J}, \mathbf{M}\}$ y f puede representar los campos incidentes $\{\mathbf{E}^{inc}, \mathbf{H}^{inc}\}$.

El MoM busca aproximar la incógnita f por una combinación lineal de N funciones base linealmente independientes, f_n ,

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N a_n f_n, \quad (163)$$

donde a_n son los coeficientes de la expansión. Como L es un operador lineal, al sustituir (163) en (162) tenemos

$$\sum_{n=1}^N a_n L(f_n) \approx g, \quad (164)$$

donde el error o residuo es

$$R = g - \sum_{n=1}^N a_n L(f_n) \quad (165)$$

El método se basa en forzar el residuo a cero en algún promedio, definiendo N funciones de prueba o de peso $\{w_1, \dots, w_N\}$, y proyectar en éstas

$$\langle w_m, R \rangle = \int_A w_m(\mathbf{r}) R(\mathbf{r}) dS = 0, \quad (166)$$

donde $m \in [1, \dots, N]$.

Sustituyendo el valor del residuo (165) en (166)

$$\sum_{n=1}^N a_n \langle w_m, L(f_n) \rangle = \langle w_m, g \rangle, \quad (167)$$

obtenemos un sistema de $N \times N$ ecuaciones que podemos expresar como una ecuación matricial $\mathbf{Z}\mathbf{a} = \mathbf{b}$, con elementos de matriz $Z_{mn} = \langle w_m, L(f_n) \rangle$ y con elementos del vector $b_m = \langle w_m, g \rangle$.

La función de prueba puede escogerse de manera arbitraria. En particular, en el método de Galerkin se define la función de prueba como

$$w_n = \frac{\partial}{\partial \alpha_n} f. \quad (168)$$

Sustituyendo (168) en (163) obtenemos que la función de prueba es precisamente la misma base

$$w_n = f_n. \quad (169)$$

B. Fórmulas de cuadratura gaussiana para triángulos

Una manera de aproximar numéricamente el valor de una integral definida es empleando el método de cuadratura gaussiana. Esto se hace al evaluar una función f en un número finito de puntos dentro del dominio de integración. En particular, consideremos el caso 2D cuando el dominio de integración S es un triángulo T . Para este caso tenemos

$$\int_T f(\mathbf{r}) dS = A_T \sum_{i=1}^N w_i f(\mathbf{r}_i), \quad (170)$$

donde A_T es el área del triángulo T , w_i son los factores de peso y \mathbf{r}_i son puntos dentro del triángulo.

Las posiciones \mathbf{r}_i se definen al multiplicar los nodos del triángulo ($\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3$) por las llamadas coordenadas de área (ξ_i, η_i, ζ_i) como

$$\mathbf{r}_i = \xi_i \mathbf{p}_1 + \eta_i \mathbf{p}_2 + \zeta_i \mathbf{p}_3. \quad (171)$$

Esto se hace para cada permutación distinta de las coordenada de área y se les asocia el mismo peso w_i . Por ejemplo consideremos la regla de cuadratura de tres puntos. Para este caso tenemos que $(\xi_i, \eta_i, \zeta_i) = (2/3, 1/3, 1/3)$ con un peso de $w_i = 1/3$. Estas coordenadas de área tienen 3 permutaciones como se ilustra en la figura 48.

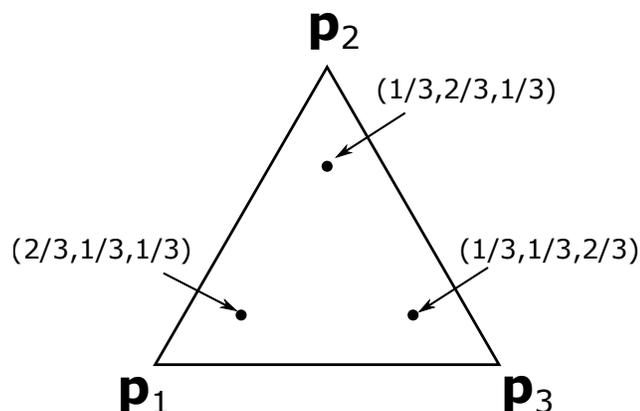


Figura 48. Regla de cuadratura gaussiana de tres puntos $(2/3, 1/3, 1/3)$. A cada permutación se le asocia el mismo peso de $1/3$. Como se ilustra en la tabla 5.

En las tabla 4-7 se muestran valores de w_i y \mathbf{r}_i para diferentes ordenes de cuadraturas gaussianas que fueron tomadas de la referencia (Cowper, 1973).

Tabla 4. Regla de cuadratura gaussiana de un punto (punto medio).

i	ξ_i	η_i	ζ_i	w_i
1	0.33333333	0.33333333	0.33333333	1

Tabla 5. Regla de cuadratura gaussiana de tres puntos.

i	ξ_i	η_i	ζ_i	w_i
1	0.66666667	0.16666667	0.16666667	0.33333333
2	0.16666667	0.66666667	0.16666667	0.33333333
3	0.16666667	0.16666667	0.66666667	0.33333333

Tabla 6. Regla de cuadratura gaussiana de siete puntos.

i	ξ_i	η_i	ζ_i	w_i
1	0.33333333	0.33333333	0.33333333	0.22500000
2	0.05971587	0.47014206	0.47014206	0.13239415
3	0.47014206	0.05971587	0.47014206	0.13239415
4	0.47014206	0.47014206	0.05971587	0.13239415
5	0.79742698	0.10128650	0.10128650	0.12593918
6	0.10128650	0.79742698	0.10128650	0.12593918
7	0.10128650	0.10128650	0.79742698	0.12593918

Tabla 7. Regla de cuadratura gaussiana de trece puntos.

i	ξ_i	η_i	ζ_i	w_i
1	0.3333333333333333	0.3333333333333333	0.3333333333333333	-0.149570044467670
2	0.479308067841923	0.260345966079038	0.260345966079038	0.175615257433204
3	0.260345966079038	0.260345966079038	0.479308067841923	0.175615257433204
4	0.260345966079038	0.479308067841923	0.260345966079038	0.175615257433204
5	0.869739794195568	0.065130102902216	0.065130102902216	0.053347235608839
6	0.065130102902216	0.065130102902216	0.869739794195568	0.053347235608839
7	0.065130102902216	0.869739794195568	0.065130102902216	0.053347235608839
8	0.638444188569809	0.048690315425316	0.312865496004875	0.077113760890257
9	0.638444188569809	0.312865496004875	0.048690315425316	0.077113760890257
10	0.312865496004875	0.048690315425316	0.638444188569809	0.077113760890257
11	0.312865496004875	0.638444188569809	0.048690315425316	0.077113760890257
12	0.048690315425316	0.312865496004875	0.638444188569809	0.077113760890257
13	0.048690315425316	0.638444188569809	0.312865496004875	0.077113760890257

C. Elementos de matriz en términos de la función de Green escalar

Los elementos \mathcal{D}_{mn}^i podemos reescribirlos como (Kern, 2011)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}_{mn}^i &= \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} \tilde{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS' dS, \\
 &= \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} \left(\tilde{\mathbf{I}} + \frac{\nabla \nabla}{k_i^2} \right) G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS', \\
 &= \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS' - \frac{1}{k_i^2} \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \nabla \int_{S_n} \nabla' G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS', \\
 &= \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS' + \frac{1}{k_i^2} \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \nabla \int_{S_n} G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS', \\
 &= \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS' + \frac{1}{k_i^2} \int_{S_m} \nabla \cdot \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \int_{S_n} G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS dS',
 \end{aligned} \tag{172}$$

donde se empleó que $\nabla f \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot (f\mathbf{u}) - u(\nabla \cdot \mathbf{u})$ y el teorema de la divergencia para superficies.

Los elementos \mathcal{K}_{mn}^i pueden reescribirse como

$$\begin{aligned}
 \mathcal{K}_{mn}^i &= \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} [\nabla' \times \tilde{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS' dS, \\
 &= \int_{S_m} \mathbf{f}_m(\mathbf{r}) \cdot \int_{S_n} [\nabla' G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \times \mathbf{f}_n(\mathbf{r}') dS' dS,
 \end{aligned} \tag{173}$$

donde se empleó que $[\nabla' \times \tilde{\mathbf{G}}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] = [\nabla' G_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \times \tilde{\mathbf{I}}$.

D. Descomposición multipolar caso 3D a la Bohren

La solución de la ecuación de helmholtz escalar es

$$\psi_{lm} \sim Z_m(\rho) P_m^l(\cos \theta) e^{il\phi} \quad (174)$$

Mientras que los vectores armónicos generados son

$$\mathbf{M}_{lm} = (i\pi_{lm}(\cos \theta)\hat{\mathbf{e}}_\theta - \tau_{lm}(\cos \theta)\hat{\mathbf{e}}_\phi) Z_m(\rho) e^{il\phi}, \quad (175)$$

$$\mathbf{N}_{lm} = l(l+1)P_l^m(\cos \theta) \frac{Z_m(\rho)}{\rho} e^{il\phi} \hat{\mathbf{e}}_r + [\tau_{lm}(\cos \theta)\hat{\mathbf{e}}_\theta + i\pi_{lm}(\cos \theta)\hat{\mathbf{e}}_\phi] \frac{[Z_m(\rho)]'}{\rho} e^{il\phi}, \quad (176)$$

donde hemos usado la notación $\pi_{lm}(\cos \theta) = \frac{l}{\sin \theta} P_m^l(\cos \theta)$ y $\tau_{lm}(\cos \theta) = \frac{dP_m^l(\cos \theta)}{d\theta}$.

En términos de los vectores armónicos esféricos (175)-(176) los campos esparcidos fuera de una esfera virtual que contiene al objeto esparcidor situado en el origen son

$$\mathbf{E}_{sca}(\mathbf{r}) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l=-m}^m iE_{lm} (a_E(l, m)\mathbf{N}_{lm} + a_M(l, m)\mathbf{M}_{lm}), \quad (177)$$

$$\mathbf{H}_{sca}(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z_0} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l=-m}^m E_{lm} (a_M(l, m)\mathbf{N}_{lm} + a_E(l, m)\mathbf{M}_{lm}), \quad (178)$$

donde $E_{lm} = E_0 i^m (2m+1) \frac{(m-l)!}{(m+l)!}$.

E. GSA por un cilindro infinito en incidencia normal

El problema del esparcimiento en 2ω por un cilindro infinito en incidencia normal puede resolverse analíticamente (Valencia *et al.*, 2004). En la GSA las soluciones poseen la misma forma que el caso lineal con la excepción que en el caso no lineal no hay campo incidente.

$$\begin{aligned}\psi_p^I(r, \theta|2\omega) &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} b_l H_l^1(\kappa_{2\omega}^I) \exp(il\phi), \quad r > R, \\ \psi_p^{II}(r, \theta|2\omega) &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_l J_l^1(\kappa_{2\omega}^{II}) \exp(il\phi), \quad r < R,\end{aligned}$$

donde $\kappa_{2\omega}^R = n_R(2\omega)(2\omega r/c)$, los coeficientes de la expansión b_l y c_l se obtienen al evaluar los campos en $r = R$ e imponer las condiciones de frontera (127) y (128). Realizando lo anterior, los coeficientes para el segundo armónico son:

$$\begin{aligned}b_m &= i^m K \left[\frac{(\frac{\chi_{\perp\perp\perp}}{2\rho} V_2^m - \chi_{\perp\parallel\parallel} V_3^m + \eta_{\perp\parallel\parallel} V_4^m + \frac{\chi_b}{k^2} V_5^m) J_m(2n_{2\omega}\rho) + \frac{\chi_{\parallel\perp\perp}}{n_{2\omega}} V_1^m J_m'(2n_{2\omega}\rho)}{J_m(2n_{2\omega}\rho)[H_m(2\rho)]' - \frac{1}{n_{2\omega}} J_m'(2n_{2\omega}\rho) H_m(2\rho)} \right], \\ c_m &= i^m K \left[\frac{(C_2 V_2^m + C_3 V_3^m + C_4 V_4^m + C_5 V_5^m) H_m(2\rho) - C_1 V_1^m [H_m(2\rho)]'}{J_m(2n_{2\omega}\rho)[H_m(2\rho)]' - \frac{1}{n_{2\omega}} J_m'(2n_{2\omega}\rho) H_m(2\rho)} \right],\end{aligned}$$

donde $K = 8\pi|\psi_{0z}|/R$, $\rho = kR$,

$$\begin{aligned}V_1^m &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} k T_k^p(\rho) U_{m-k}^p(\rho), \\ V_2^m &= 2 \sum_{k=-\infty}^{\infty} k(m-k)^2 T_k^p(\rho) T_{m-k}^p(\rho), \\ V_3^m &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} (m-k) U_k^p(\rho) U_{m-k}^p(\rho), \\ V_4^m &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} (m-k) T_k^p(\rho) T_{m-k}^p(\rho), \\ V_5^m &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} (m-k) T_k^s(\rho) T_{m-k}^s(\rho),\end{aligned}$$

$$\text{y } T_l^\zeta(x) = J_l(x) + a_l^\zeta H_l^1(x), \quad U_l^\zeta(x) = \frac{dT_l^\zeta(x)}{dx}.$$

Puede demostrarse que los coeficientes b_m cumplen la relación $b_{-m} = (-1)^{m+1}b_m$, por lo que la eficiencia esparcida en 2ω está dada por

$$Q_{p\zeta}(2\omega) = \int_0^{2\pi} q_{p\zeta}(\theta|2\omega)d\theta = \frac{8\pi}{\rho c |\psi_{0\zeta}|^4} \sum_{m=1}^{\infty} |b_m|^2,$$

donde

$$q_{p\zeta}(\theta|2\omega) = \frac{16}{\rho c |\psi_{0\zeta}|^4} \left| \sum_{m=1}^{\infty} (-i)^m b_m \sin(m\theta) \right|^2,$$

representa el diferencial de intensidad de esparcimiento por ángulo.

F. Estructura de los códigos

A continuación presentamos la estructura general de los códigos para su uso o implementación. Nos enfocaremos en describir brevemente los códigos de la ecuación integral de superficie y el código para la descomposición multipolar en 3D. En la nomenclatura de los códigos que se presentan a continuación, se usó la nomenclatura del lenguaje libre Julia ¹.

La idea es que una vez que optimicemos los códigos (paralelización, mejor condición para aplicar la sustracción de la singularidad y uso de la función de Green diádica), se encuentren documentados y disponibles en el repositorio de CICESE y en <https://github.com/mangelgm>.

Estructura ecuación integral de superficie

En general, el código de la ecuación integral de superficie consta de tres módulos principales

- La creación de un objeto o estructura que contiene la información del mallado de la superficie: esquinas, etiquetas de los triángulos, puntos medios, triángulos vecinos, normales, áreas y perímetros.
- El cálculo de las corrientes equivalentes **J** y **M**. Esto se logra al encontrar los pesos de las corrientes equivalentes para cada pareja de triángulos dada por la base RWG.
- El cálculo de los campos esparcidos y las eficiencias.

Para la construcción del objeto o estructura que contiene la información de la superficie nos basamos en el trabajo y los códigos para el caso de una esfera de conductor perfecto presentados en (Aas, 2012). Estos códigos escritos para la formulación EFIE fueron adaptados para que eligieran un mallado creado por Netgen en formato Neutral Surface Mesh lo que permitió usarlos para otras geometrías. La estructura de la malla es de la forma:

¹<https://julia-lang.org>

surfacemesh # Nombre del formato

845 # Num. de esquinas

 -1 -1 -1 # Coord. de las esquinas

 -1 -1 -0.333333

 -1 -1 0.333333

 -1 -1 1

 -1 -0.333333 -1

 -1 0.333333 -1

 -1 1 -1

 .

 .

 .

1024 # Num de triangulos

 1 152 153 # Esquinas o puntos que forman el triangulo

 2 156 159

 3 162 163

 6 178 182

 7 185 186

 .

 .

 .

Este formato de mallado es procesado por una serie de subrutinas que crean un objeto o estructura que contiene toda la información de la superficie.

Mallado de la superficie y definicion de la base RWG

```
mesh_surf = tri_surface(make_mesh(read_data, radio_esc)...);
```

La estructura es de la forma

```
mutable struct tri_surface
```

```
    po::Array{Float64,2}          # puntos o esquinas de cada tri
```

```
    tri::Array{Int64,2}          # etiquetas de las coord (3*tri)
```

```
    mid::Array{Float64,2}        # Coord. punto medio de cada tri
```

```
    neigh::Array{Int64,3}        # vecinos por tri
```

```

normal::Array{Float64,2}      # normal del tri
area::Array{Float64,1}       # area del tri
perimetro::Array{Float64,1}  # perimetro del tri
end

```

Esta estructura creada contiene información del área y de las normales de cada triángulo, así como la información de los vecinos que tiene cada triángulo, es decir, el lado que comparte cada pareja en las bases RWG. En particular, si el mallado se creó en un formato STL estándar (sin juntas T), cumple con que el número de lados N es igual a $3/2$ el número de triángulos N_t .

En el código anterior y siguiente, se usó la nomenclatura del lenguaje libre Julia ².

Una vez que termina el módulo anterior, se procede a la creación de la matriz de MoM para determinar las corrientes equivalentes. En particular, para el caso del conductor perfecto sólo es necesario determinar la densidad de corriente superficial \mathbf{J} empleando los elementos de matriz D_{mn}^1 , así como el campo eléctrico incidente en la superficie (Aas, 2012). Por lo que la matriz a resolver para este caso es de $N \times N$.

Para el cálculo de las integrales de los elementos de matriz se creó un módulo que de acuerdo a la cuadratura gaussiana que se elija determina los puntos dentro de las parejas de triángulos (la pareja de observación y la del fuente). En particular, para los puntos singulares $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = R \rightarrow 0$ usamos el método de sustracción de singularidad proporcionado en (Villa, 2007).

En general, en este trabajo nos interesó el caso de partículas dieléctricas, por lo que fue necesario extender el código empleando la formulación PMCHW (Ecuación (91)). Con esto, por cada pareja de triángulos existen dos incógnitas que deben determinarse (una para \mathbf{J} y otra para \mathbf{M}). Por lo que la matriz a resolver es de $2N \times 2N$ incógnitas.

La función que hace lo anterior es

```

JM_coeff = JM_gen(k, eps_fun[j], k_hat, quad_points,
                  E_inc_0*E_inc_hat, mesh_surf, "PMCHW")

```

²<https://julialang.org>

Para calcular los elementos de la matriz es necesario calcular las submatrices de la ecuación (91) dentro y fuera de la partícula. Así como los campos eléctrico y magnético incidentes evaluados en la superficie.

```
elseif formulacion=='PMCHW"
    b_vec[1:n_pairs] = -fE_vec[:]
    b_vec[n_pairs+1:2*n_pairs] = -fH_vec[:]

    MoM[1:n_pairs, 1:n_pairs] = 1im*omega*mu_0*(D_1[:, :] + D_2[:, :])
    MoM[1:n_pairs, (1 + n_pairs):2*n_pairs] = -(K_1[:, :] + K_2[:, :])

    MoM[(1+n_pairs):2*n_pairs, 1:n_pairs] = (K_1[:, :] + K_2[:, :])
    MoM[(n_pairs+1):2*n_pairs, (n_pairs+1):2*n_pairs] = (
        1im*omega*eps_0*(D_1[:, :] + eps_2*D_2[:, :]) )

end # if formulacion

JM_coeff = \ (MoM, b_vec)

return JM_coeff
```

Una vez que se obtienen las corrientes equivalentes podemos obtener los campos esparcidos sobre una esfera de referencia que encierra la partícula.

```
# Lista del campo inc evaluado en los puntos de observacion
E_inc_r_list = zeros(ComplexF64, (M_points, 3))
for i in 1:M_points
    E_inc_r_list[i, :] = E_inc_0 * E_inc_hat * exp(1im * dot(k_vec,
        vec(r_list[i, :])))
end

# Calculando el campo en los puntos de observacion
println("Calculando E en los puntos de obs. \n")
Total_E = 0
E_result = EJM_calculation(k, quad_points, E_inc_r_list,
```

```
JM_coeff, r_list, Total_E, mesh_surf);
```

Con estos campos esparcidos pueden obtenerse las eficiencias o las secciones transversales.

```
# Calculando la eficiencia esparcida
suma_cross_sca = 0.0
for i in 1:M_points
    suma_cross_sca += mesh_surf_virtu.area[i]*sum(abs2.(E_result[i,:]))
end
cross_sca[j] = suma_cross_sca

end

writedlm("Fano_cross_sca_info.dat", [lambdas_arr[:] cross_sca[:]], " ")
```

Estructura de la descomposición multipolar

Los campos esparcidos eléctrico y magnético obtenidos sobre una esfera virtual que encierra la partícula pueden emplearse también para el cálculo de los coeficientes multipolares. Para esto es necesario proyectar los campos en los armónicos esféricos e integrar sobre la esfera virtual.

$$a_E(l, m) = \frac{(-i)^{l+1}kr}{h_l^{(1)}(kr)E_0[\pi(2l+1)l(l+1)]^{1/2}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^* \hat{f} \cdot \mathbf{E}_s(\mathbf{r}) \sin\theta d\theta d\phi,$$

donde

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \exp^{im\phi}$$

grado l y orden m .

Para facilitar esto, puede crearse unas funciones interpoladas para los campos eléctrico y magnéticos. Por ejemplo, para el campo eléctrico esparcido (parte real e imaginaria) tenemos que

```
Re_ex = Spline2D(theta_arr, phi_arr,
    transpose(reshape(rexv, (N_theta, N_phi))), kx=3, ky=3);
```

```

Re_ey = Spline2D(theta_arr, phi_arr,
                 transpose(reshape(reyv, (N_theta, N_phi))), kx=3, ky=3);
Re_ez = Spline2D(theta_arr, phi_arr,
                 transpose(reshape(rezv, (N_theta, N_phi))), kx=3, ky=3);

Im_ex = Spline2D(theta_arr, phi_arr,
                 transpose(reshape(iexv, (N_theta, N_phi))), kx=3, ky=3);
Im_ey = Spline2D(theta_arr, phi_arr,
                 transpose(reshape(ieyv, (N_theta, N_phi))), kx=3, ky=3);
Im_ez = Spline2D(theta_arr, phi_arr,
                 transpose(reshape(iezv, (N_theta, N_phi))), kx=3, ky=3);

```

Con esto, el coeficiente $a_E(1, 1)$ se obtiene como

$l, m = 1, 1$

```

aE_nE = complex_quad((Theta, Phi) -> (
    sin(Theta)*cos(Phi)*(Re_ex(Theta, Phi) + 1im*Im_ex(Theta, Phi))
    + sin(Theta)*sin(Phi)*(Re_ey(Theta, Phi) + 1im*Im_ey(Theta, Phi))
    + cos(Theta)*(Re_ez(Theta, Phi) + 1im*Im_ez(Theta, Phi))
    )*(conj(py_sp.sph_harm(l, m, Phi, Theta)))*sin(Theta),
    0.0, 2*pi, Theta->0, Theta->pi)[1]

```

```

aE_nE = aE_nE*(-1im)^(l+1)*x0/(h_sp(l, x0)*sqrt(pi*(2l+1)*l*(l+1)))

```