

Universidad de Sonora
Departamento de Investigación en Física



“Esparcimiento resonante de luz debido a una esfera detrás de una superficie”

TESIS

**Que para obtener el grado de
Maestro en Ciencias (Física)**

Presenta

Luis Patricio Ramírez Rodríguez

Septiembre de 2010

Hermosillo, Sonora.

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

COMITÉ EVALUADOR DE TESIS

Dr. Jorge Armenta Gaspar Armenta.

Dr. Felipe Ramos Mendieta.

Dr. Raúl García Llamas.

Dr. José Manuel Nápoles Duarte.

Agradecimientos:

A mi familia, siempre estuvieron apoyándome toda la vida.

A mi otra familia, Belem, Pancho, Chava, Lolis, Paco, Julian, Geli.

A mi asesor Raúl García Llamas por ayudarme con el trabajo y tenerme mucha paciencia.

Al pepe, al Cardenas, a Jauregui, a Calcaneo, a María Elena, Angelina, al Temis, al Horacio, a Tere, hasta al Luis.

A Conacyt por su apoyo económico en la maestría.

Contenido de la Tesis

Contenido de la Tesis	<i>i</i>
Introducción	1
1 Difracción de Ondas Electromagnéticas por Esferas	6
1.1 Las Ecuaciones de Maxwell	6
1.2 Ondas Evanescentes y Campo Cercano	11
1.3 Soluciones a la Ecuación de Onda Esférica	11
1.4 Desarrollo Multipolar de los Campos	12
1.5 El Desarrollo Multipolar de una Onda Plana	16
1.6 Teoría de Mie	18
1.7 Las Secciones Eficaces Total, Esparcida y Absorbida	23
1.8 Modelo de Drude	24
2 Una Extensión de la Teoría de Mie	26
2.1 El Sistema Esfera-plano	26
2.2 El Teorema de Adición-Traslación para Ondas Esféricas Vectoriales	29
2.3 Aplicación del Teorema de Adición-Traslación en el Problema Esfera-Plano	32
2.4 La Difracción por el Sistema Esfera-Plano	37
3. Resultados Numéricos	43
3.1 Modos Susurrantes de Galería en Esferas Dieléctricas	43
3.2 Plasmones de Superficie en Esferas Metálicas	51
3.3 Esfera-Plano	59
Conclusiones y Perspectivas	61
Bibliografía	63

Introducción

En los últimos años ha existido un gran avance en la ciencia y tecnología con respecto a la fabricación, manipulación y la medición de propiedades de dispositivos a nivel de escala nanométrica. El estudio de plasmones de superficie y su interacción con nanoestructuras dio lugar al nacimiento de dos áreas, la plasmónica y la de los metamateriales. Los plasmones son oscilaciones colectivas de electrones, y se han encontrado en volumen, en superficies y en partículas metálicas. El estudio de los plasmones es de especial interés en sistemas con nanopartículas metálicas de forma esférica.[1]

Las nanoestructuras y las nanopartículas se utilizan en la fabricación de sensores biológicos y químicos, en la nanolitografía, en el monitoreo ambiental, filtros ópticos, en guías de onda y en la medicina. Se han creado nanopartículas con distintas morfologías como anillos, cubos, pirámides y esferas.

Para comprender las propiedades ópticas de una partícula de forma esférica y estructuras más complicadas debemos remontarnos al inicio del siglo XX. En aquellos años Gustav Mie estudia la difracción de una onda electromagnética por una esfera y encuentra una solución exacta del esparcimiento de una onda plana monocromática debido a una esfera homogénea [2], esto es la base para el entendimiento de la respuesta óptica de las nanopartículas. En el mismo año, Peter Debye resolvió un problema similar con el objetivo de encontrar la presión de la luz sobre la esfera, con el cual se Doctoró asesorado por el reconocido físico Arnold Sommerfeld. Es interesante mencionar que se pueden encontrar pocos trabajos acerca de este problema desde el siglo diecinueve, incluso Mie hace referencia a Thompson, Raleigh y Lorentz, ya que estos tres por separado estudiaron casos particulares de la difracción por una esfera. Sin embargo, en la actualidad, se reconoce a Mie como precursor de esta teoría.

En 1977 Ashkin y Dziedzic observaron resonancias en esferas dieléctricas al estudiar la levitación de las mismas, estas resonancias son llamados modos de galería susurrantes (Whispering Gallery Modes WGM por sus siglas en Inglés) y se deben al campo evanescente producido por la reflexión total interna del campo incidente [3].

Un año después, Chýlek al estudiar el mismo sistema encuentra que a cada resonancia es posible asociarle un coeficiente del desarrollo multipolar del campo esparcido de la solución de Mie, son las llamadas ondas parciales [4].

Los científicos se enfocaron en la búsqueda de resonancias en esferas, Ruppín en 1970 [5] encuentra los modos para el caso no-retardado. Englman y Ruppín así como Fuchs y Kliwer, de forma independiente, en 1968 encuentran los modos de una esfera para el caso retardado y aplicados a esferas de materiales iónicos [6,7]. En 1985 Martinos encuentra los modos para una esfera metálica probando además la existencia de modos virtuales para frecuencias mayores a las de la frecuencia de plasma, calcula las frecuencias complejas de excitación como función del radio de la esfera y la sección eficaz de absorción (esparcimiento) como función de la energía de excitación.[8]

En 2005 Stout *et al.*, [9] resuelven el problema de la difracción de una onda plana por una esfera homogénea suspendida en un medio aniso-trópico. Berg *et al* en 2008 calculan el campo cercano para una esfera con índice de refracción de 1.33 en el vacío, para estudiar la simetría del campo eléctrico en el interior de la esfera y relacionarla con los parámetros de Stokes. [10, 11]

En 2007 Derkachova y Kolwas [12] obtienen las frecuencias complejas de excitación en función del radio de la esfera metálica. Ancy *et al.*, en 2009 calculan sección eficaz de esparcimiento y de absorción respecto a la energía de excitación, las cuales muestran máximos que están asociado a un modo [13], resultado que ya había sido obtenido por Martinos [8].

Cabe aclarar que frecuencias asociadas a los modos (WGM, plasmones) dependen del tamaño, la forma, y composición de la partícula, así como del medio en que se encuentra inmersa la partícula. Además, no es necesario usar algún medio de acoplamiento para excitarlos [14]. En 1999 usando la teoría FDTD, Shinya y Fukui estudian la interacción de ondas evanescentes con micro esferas dieléctricas y excitan un WGM. [15]

Todos los trabajos anteriores están relacionados con los modos asociados a o la difracción de ondas por esferas, cuyo radio ha sido variado desde nanómetros hasta micras y formadas por materiales metálicos, iónicos y semiconductores. De manera paralela otros trabajos fueron desarrollándose para incluir la interacción de esferas con otras partículas o cerca de interfaces.

Las frecuencias de los modos de superficie de una esfera cerca de una superficie que separa dos medios semi-infinitos en el caso no-retardado fueron calculadas por Nkoma [16]. El demostró que existen ahora dos modos por cada orden multipolar y las frecuencias dependen de la distancia de separación plano-esfera. En el caso límite de una separación infinita, esta solución converge a la encontrada por Ruppin.

Muchos investigadores se han interesado en el problema del esparcimiento de una esfera cerca o sobre la interfaz que separa dos medios semi-infinitos: el precursor de esto fue Chew *et al.*, en 1976 [17], trabajos posteriores fueron presentados por Bobbert y Vlieger en 1986 [18], Lindell *et al.*, en 1991 [19], Videen en 1991-1993 [20, 21, 22], Jonhson en 1992-1995 [23, 24, 25], Fucile *et al.*, 1997 [26], en 1998 Wriedt y Doicu [27], Ishikawa *et al.*, en 2000 [28], Jory *et al.*, en 2003 [29] y Heitzel *et al.*, 2008[30].

G. Videen, estudió el esparcimiento de una esfera arriba o sobre una superficie plana que divide a dos medios semi-infinitos usando el método de imágenes y un desarrollo multipolar. Sin embargo, ésta teoría es válida en los siguientes tres situaciones: a) cuando el plano y la esfera están muy alejados, b) cuando el radio de la esfera es pequeña con respecto a la longitud de onda incidente y c) cuando la diferencia del índice de refracción entre ambos medios (esfera, medio semi-infinito) es muy grande o muy pequeño [20, 21, 22]

Johnson considera que el medio semi-infinito que no alberga a la esfera es un conductor perfecto. [23, 24, 25].

Fucile *et al.*, [26] usando un desarrollo multipolar resuelven el problema de una esfera cerca de una interfaz, sus resultados concuerdan con [13], [18] y [19] bajo las aproximaciones que ellos tomaron.

Wriedt y Doicu usa el método de la frontera extendida (extended boundary method) y muestra resultados del esparcimiento como función del ángulo para esfera de radio de 0.1 μm y 0.3 μm sobre sustratos de silicio [27]

Ishikawa *et al.*, [28] estudia el acoplamiento de las resonancias de una micro-esfera sobre un sustrato dieléctrico. Cuando existe un modo es posible asociarlo a una onda parcial, tal y como se

mencionó con anterioridad, con base a esto Ishikawa reduce enormemente los cálculos mostrando un WGM debido sólo a la onda parcial correspondiente.

Jory *et al.*, [29] mide el esparcimiento de luz por esfera de $1.4 \mu\text{m}$ y $5 \mu\text{m}$ detrás de un interfaz vidrio/aire debajo del ángulo crítico para las polarizaciones p y s ; hace una comparación con la teoría de la referencia [18].

Heitzel *et al.*, [30] excitó un plasmón en una esfera de Au de 40 nm y 250 nm para hacer un patrón sobre un sustrato de Silicio usando un laser de 532 nm . Usando el método FDTD resuelve el problema teórico, el resultado de esto se correlaciona de buena forma con el experimento.

El principal objetivo de este trabajo es obtener la solución teórica de la difracción de la luz debido a una, micro- o nano-, esfera cerca de una interfaz plana la cual divide a dos medios semi-infinitos. La esfera puede ser metálica y soportar plasmones de superficie o dieléctricas que pueden sostener los modos conocidos como WGM.

El desarrollo de la tesis está hecho de la siguiente manera:

El capítulo 1 comienza con una breve introducción de las ecuaciones de Maxwell y el concepto del campo cercano. Se introducen las funciones Bessel y los armónicos esféricos para resolver la ecuación de la onda esférica escalar, se resuelven las ecuaciones de Maxwell mediante un desarrollo multipolar donde se usan los vectores esféricos armónicos, comenzando con el desarrollo de una onda plana, para posteriormente estudiar el problema del esparcimiento de la esfera. Por último, se aborda el modelo de Drude.

Se toma la notación del texto *Classical Electrodynamics* por D. Jackson [35], ya que, es el libro base para el curso de electrodinámica del posgrado del Departamento de Investigación en Física. Considero que el presente trabajo es un complemento al curso de Electrodinámica II ya que el capítulo 10 menciona de forma breve el problema de Mie.

Este fue el capítulo de entrenamiento teórico en el uso de los vectores esféricos armónicos, así como el entendimiento de sus propiedades matemáticas. Los vectores esféricos armónicos es la piedra angular de la expansión multipolar de un campo electromagnético.

En el capítulo 2 se plantea el sistema ha estudiar que es el de una esfera detrás de un plano, se utiliza la misma metodología que en el capítulo 1 para resolver el problema de difracción de luz por dicho sistema (dividir el espacio en regiones y escribir los campos en cada medio como un desarrollo multipolar). En la sección 2.2 se introduce el teorema de la adición-traslación para ondas vectoriales esféricas y se usa, en la sección 2.3, para acoplar los campos en la frontera de la esfera de radio a y en el plano colocado a una distancia de $-(a + D)$, se consideró que el campo esparcido por el plano proviene de una esfera “imagen” colocada a una distancia $-2(a + D)$ de la esfera.

Por último, en el capítulo 3 se presentan los resultados numéricos, criterio de convergencia, el campo cercano, la sección de extinción de una esfera dieléctrica y metálica. En la sección 3.1 se estudia la difracción por esferas dieléctricas y se excita un WGM para las polarizaciones TE y TM. El caso de esferas metálicas se estudia en la sección 3.2 y se excita un plasmón de superficie, el cual solo existen en el caso TM. En ambos casos se compara el campo cercano y el módulo de la componente φ del campo eléctrico de esparcimiento en resonancia y fuera de ella. Por último, en la sección 3.3, se muestra un resultado preliminar del campo cercano del sistema plano/esfera.

En el apartado denominado **conclusiones y perspectivas** se plantean las principales contribuciones de este trabajo y se analiza la perspectiva de trabajos futuros.

Capítulo 1

Difracción de Ondas Electromagnéticas por Esferas

En el presente capítulo se estudia el campo lejano y cercano de una onda electromagnética plana difractada por una micro- o nano- esfera, metálica o dieléctrica, de radio a , suspendida dentro de un medio no absorbente. Para resolver las ecuaciones de Maxwell se utiliza un desarrollo multipolar para representar a los campos, y se divide el espacio en dos regiones, fuera (medio 1) y dentro (medio2) de la esfera. Las condiciones de frontera se usan para acoplar los campos. Además se introducirá el concepto de campo cercano, y se describe de forma breve el modelo de Drude.

1.1 Las Ecuaciones de Maxwell.

Los fenómenos electromagnéticos se describen utilizando una teoría de campo, en el cual las funciones dependen de la posición y del tiempo, las ecuaciones de la electrodinámica clásica se llaman ecuaciones de Maxwell [35] y se muestran en su forma diferencial y en el SI a continuación:

$$\nabla \cdot \vec{D}' = \rho \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}' = 0 \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \vec{E}' = -\frac{\partial \vec{B}'}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \vec{H}' = \frac{\partial \vec{D}'}{\partial t} + \vec{J}' \quad (1.4)$$

donde $\vec{E}' = \vec{E}'(\vec{r}, t)$, $\vec{D}' = \vec{D}'(\vec{r}, t)$, $\vec{H}' = \vec{H}'(\vec{r}, t)$, $\vec{B}' = \vec{B}'(\vec{r}, t)$, $\vec{J}' = \vec{J}'(\vec{r}, t)$, $\rho' = \rho'(\vec{r}, t)$ son el campo eléctrico, desplazamiento, campo magnético, densidad de flujo magnético, densidad de corriente y densidad volumétrica de carga, respectivamente.

La ecuación (1.1) se le llama ley de Gauss, (1.2) la no existencia de monopolos magnéticos, (1.3) la ley de Faraday y (1.4) ley de Ampere-Maxwell.

Existen conexiones entre el campo eléctrico y el desplazamiento que se produce en un material, y el campo magnético y la densidad de flujo magnético, a estas se les llaman relaciones constitutivas.

Cuando el material es homogéneo, isotrópico, no magnético, de respuesta local y lineal las relaciones constitutivas son:

$$\vec{D}'(\vec{r}, t) = \epsilon \vec{E}'(\vec{r}, t) \quad (1.5)$$

$$\vec{B}'(\vec{r}, t) = \mu \vec{H}'(\vec{r}, t) \quad (1.6)$$

donde ϵ es la función dieléctrica y μ es la permeabilidad magnética del medio.

Aplicando el rotacional a la ley de Ampere-Maxwell (1.4), asumiendo que no tenemos fuentes y usando las relaciones constitutivas (1.5) y (1.6) obtenemos una ecuación diferencial lineal de segundo orden, la ecuación de onda,

$$\nabla^2 \vec{H}'(\vec{r}, t) - \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{H}'(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (1.7)$$

La ecuación (1.7) es válida también para el campo eléctrico o bien para una de las componentes de los mismos. Por ser una ecuación diferencial independiente del tiempo, es necesaria establecer condiciones especiales, llamadas condiciones de frontera. La deducción de las mismas aparecen en los textos convencionales de electrodinámica, sin embargo, por completez se dará una breve explicación.

A continuación se analizará la variación de los vectores del campo magnético y el desplazamiento eléctrico al pasar por una superficie que separa dos medios semi-infinitos que son ópticamente distintos. Un vector unitario normal a la interface se denota como \hat{n} , la dirección es positiva si la normal se dirige hacia afuera del material, como se muestra en la figura 1.

Aplicando el teorema de la Divergencia a la ecuación (1.1) y (1.2) en el volumen contenido por el cilindro mostrado en la figura y en el límite cuando la altura del cilindro es cero, se llega a

$$\begin{aligned} (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) \cdot \hat{n} &= \sigma_s \\ (\vec{B}_2 - \vec{B}_1) \cdot \hat{n} &= 0 \end{aligned} \quad (1.8)$$

donde σ_s es la densidad de carga superficial. La componente normal de la densidad de flujo magnético es siempre continua y la componente normal del desplazamiento eléctrico es discontinua cuando la densidad de carga superficial sea distinta de cero.

Al aplicar el teorema de Stokes a la ecuación (1.3) y (1.4) en la trayectoria rectangular cerrada mostrada la figura 1 y tomando el límite cuando la anchura tiende a cero, obtenemos

$$\begin{aligned}(\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \times \hat{n} &= 0 \\(\vec{H}_2 - \vec{H}_1) \times \hat{n} &= \vec{J}_s\end{aligned}\tag{1.9}$$

donde \vec{J}_s es la densidad de corriente superficial. Por lo tanto, las componentes tangenciales de los campos son continuas si la densidad de corriente es cero.

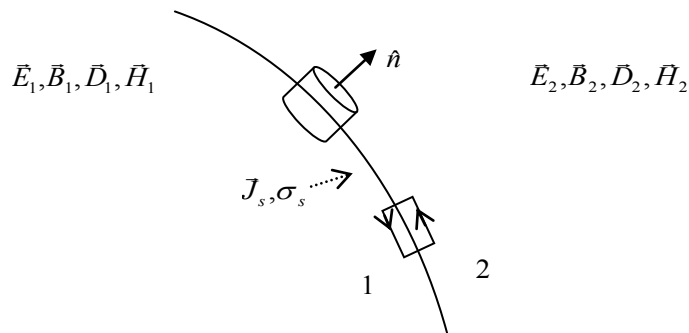


Figura 1. Diagrama de una superficie entre dos distintos medios. Donde σ_s y \vec{J}_s son la densidad de carga superficial y densidad de corriente superficial en la frontera, respectivamente.

Campos temporalmente armónicos

Si se asume que la dependencia temporal de los campos es temporalmente armónica, entonces

$$\vec{H}'(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}) \exp(-i\omega t)\tag{1.10}$$

En este caso, el resto de los campos y las fuentes presentan el mismo comportamiento temporal.

En esta situación las ecuaciones de Maxwell toman la forma siguiente

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (1.11)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (1.12)$$

$$\nabla \times \vec{E} = +i\omega\vec{B} \quad (1.13)$$

$$\nabla \times \vec{H} = -i\omega\vec{D} + \vec{J} \quad (1.14)$$

donde ahora $\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}), \vec{D} = \vec{D}(\vec{r}), \vec{H} = \vec{H}(\vec{r}), \vec{B} = \vec{B}(\vec{r}), \vec{J} = \vec{J}(\vec{r}),$ y $\rho = \rho(\vec{r})$ poseen una dependencia solamente espacial.

Asumiendo esta dependencia, la ecuación de onda (1.7) se transforma en la ecuación de Helmholtz,

$$\nabla^2 \vec{H}(\vec{r}) + q^2 \vec{H}(\vec{r}) = 0 \quad (1.15)$$

donde q es el número de onda,

$$q = \sqrt{\epsilon\mu} \omega \quad (1.16)$$

Las ondas electromagnéticas transportan energía y momento. Es muy importante determinar la energía absorbida y/o esparcida debido a alguna geometría en particular. La energía por unidad de área y tiempo transportada por los campos está determinada por el vector de Poynting \vec{S} ,

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \text{Re}\{\vec{E} \times \vec{H}^*\} \quad (1.17)$$

\vec{E} es el campo eléctrico y \vec{H}^* es el complejo conjugado del campo magnético.

El campo eléctrico \vec{E} y magnético \vec{H} en un medio que rodea a una partícula es la suma del campo incidente más el campo esparcido, como se muestra a continuación,

$$\vec{E} = \vec{E}_i + \vec{E}_s \quad (1.18)$$

$$\vec{H} = \vec{H}_i + \vec{H}_s \quad (1.19)$$

Sustituyendo la ecuación (1.18) y (1.19) en (1.17) obtenemos

$$\vec{S} = \vec{S}_i + \vec{S}_s + \vec{S}_{in} \quad (1.20)$$

donde \vec{S}_i y \vec{S}_s son los vectores de Poynting asociados al haz incidente y al esparcido respectivamente, \vec{S}_{in} indica el vector de Poynting asociado a la interferencia entre el haz incidente y al esparcido.

La integral de superficie de la proyección del vector Poynting sobre el vector unitario perpendicular a la superficie es la potencia,

$$W = \frac{1}{2} \text{Re} \left\{ \int (\vec{E}(\vec{r}) \times \vec{H}^*(\vec{r})) \cdot \hat{n} da \right\} \quad (1.21)$$

Sustituyendo (1.20) en (1.21) obtenemos

$$-W_{ab} = W_i + W_s + W_{in} \quad (1.22)$$

donde W_{ab} es el cambio de energía que es absorbida por la partícula, W_i , W_s y W_{in} son las integrales de la componente radial del vector de Poynting de la onda incidente, la esparcido y la de interferencia, respectivamente. La ecuación anterior es la conservación de la energía, es decir, la energía absorbida debe ser igual a la energía de la onda incidente más la de esparcimiento más la de interferencia.

Cuando la esfera es no-absorbente podemos escribir:

$$W_i + W_s = -W_{in} \quad (1.23)$$

Tomando la potencia del campo esparcido y dividiéndola entre el módulo del campo eléctrico incidente, obtenemos la sección eficaz total de esparcimiento (o scattering)

$$\sigma_s = \frac{W_s}{I_i} \quad (1.24)$$

Donde I_i es el producto del área de un círculo de radio a con el módulo del vector de Poynting incidente.

1.2 Ondas Evanescentes y Campo Cercano.

Un concepto central en la nano-óptica es el de onda evanescente la cual va disminuyendo su amplitud a medida que se aleja de algún objeto iluminado, por ejemplo, una esfera o un cilindro. Cabe aclarar que las contribuciones del campo evanescente son apreciables a distancia muy cercanas a la superficie, típicamente del orden de un tercio de λ [36], la longitud de onda de la luz incidente. Esta onda es posible escribirla en términos de ondas planas, o como un desarrollo multipolar, y es muy importante si se quiere comprender el comportamiento de los campos electromagnéticos en la óptica moderna. Al campo producido por contribuciones de ondas evanescentes y propagantes se le llama campo cercano.

Los primeros en reconocer la existencia de ondas electromagnéticas evanescentes fueron Sommerfeld y Zenneck [37] en su estudio de los metales, donde aparece el efecto peculiar (skin effect).

1.3 Soluciones a la Ecuación de Onda Esférica Escalar

Consideremos la ecuación (1.15) en coordenadas esféricas y proponiendo una solución $\psi(r, \theta, \varphi)$ (componentes de campos) en serie y empleando el método de separación de variables:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} \frac{f_l(r)}{\sqrt{r}} g_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.25)$$

al sustituir ψ en la ecuación escalar de Helmholtz (1.15) se encuentra dos ecuaciones, una de ellas,

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial g_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 g_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} = -l(l+1)g_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.26)$$

donde $l = 1, 2, \dots$ y $m = -l, \dots, -1, 0, +1, \dots, +l$. La solución a esta ecuación son los armónicos esféricos $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (ver ref. [35]).

La ecuación para la parte radial obtenida es,

$$\frac{d^2 f_l(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_l(r)}{dr} + \left[q^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} \right] f_l(r) = 0. \quad (1.27)$$

La ecuación (1.27) se le conoce como la ecuación de Bessel de orden $l+1/2$. Las soluciones a esta ecuación son las funciones Bessel esféricas, en honor al astrónomo alemán F.W. Bessel quién fue el primero en calcular la órbita del cometa Halley.

Las funciones Bessel esféricas de primera y segunda clase especie de orden l son

$$\begin{aligned} j_l(qr) &= (-qr)^l \left(\frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)} \right)^l \left(\frac{\text{sen}(qr)}{qr} \right) \\ y_l(qr) &= -(-qr)^l \left(\frac{1}{qr} \frac{d}{d(qr)} \right)^l \left(\frac{\text{cos}(qr)}{qr} \right) \end{aligned} \quad (1.28)$$

Al combinar las funciones Bessel esférica de primer tipo se definen las funciones Hankel esférica (funciones Bessel de tercera clase orden l)

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(qr) &= j_l(qr) + iy_l(qr) \\ h_l^{(2)}(qr) &= j_l(qr) - iy_l(qr) \end{aligned} \quad (1.29)$$

por lo tanto, la solución más general en coordenadas esféricas de la ec. (1.15) en coordenadas esféricas es:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l,m} [A_{lm}^{(1)} h_l^{(1)}(qr) + A_{lm}^{(2)} h_l^{(2)}(qr)] Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.30)$$

donde los coeficientes se determinarán usando condiciones de frontera. Para un estudio más profundo con respecto a las funciones Bessel se puede consultar las referencias [35, 40].

1.4 Desarrollo Multipolar de los Campos

Como el campo eléctrico es una cantidad vectorial y (1.30) solo representa la solución de una de sus componentes y estas están relacionadas por las ecuaciones de Maxwell. A continuación se describe un procedimiento para encontrar el campo.

Si tomamos una cantidad escalar, el producto escalar entre el vector posición y el campo eléctrico (magnético), entonces

$$\nabla^2(\vec{r} \cdot \vec{E}) = \vec{r} \cdot (\nabla^2 \vec{E}) + 2\nabla \cdot \vec{E} = \vec{r} \cdot (\nabla^2 \vec{E}) \quad (1.31)$$

ya que la divergencia del campo eléctrico es cero, en ausencia de fuentes, por lo tanto, la ecuación (1.15) se puede escribir como

$$[\nabla^2 + q^2](\vec{r} \cdot \vec{E}) = 0$$

O bien,

$$[\nabla^2 + q^2](\vec{r} \cdot \vec{H}) = 0$$

Definiendo un campo magnético multipolar o transversal eléctrico (TE) de orden (l, m) como:

$$\vec{r} \cdot \vec{H}_{lm}^{(TE)} = \frac{l(l+1)}{q} f_l(qr) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.32)$$

$$\vec{r} \cdot \vec{E}_{lm}^{(TE)} = 0 \quad (1.33)$$

donde f_l es una función Bessel esférica que se ajuste al comportamiento esperado con la magnitud r del vector posición.

Esto no es suficiente información para determinar los campos, para ello necesitamos usar las ecuaciones de Maxwell. Tomando el productor escalar del vector posición con el campo magnético de la ec. (1.13) y usando la definición del campo magnético multipolar (1.32) se obtiene la siguiente relación

$$Zq\vec{r} \cdot \vec{H}_{lm}^{(TE)} = \frac{1}{i}\vec{r} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E}_{lm}^{(TE)}) = \frac{1}{i}(\vec{r} \times \vec{\nabla}) \cdot \vec{E}_{lm}^{(TE)} = \mathcal{L} \cdot \vec{E}_{lm}^{(TE)} \quad (1.34)$$

Donde $Z = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}}$ es la impedancia del medio y $\mathcal{L} = i^{-1}\vec{r} \times \nabla$ es el operador diferencial de momento angular. Un subíndice en la impedancia indicará el medio en cuestión.

Comparando la ecuación (1.32) con (1.34) concluimos que

$$\vec{L} \cdot \vec{E}_{lm}^{(TE)} = l(l+1)Zf_l(qr)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.35)$$

El operador de momento angular afecta sólo a los esféricos armónicos. Despejando el campo eléctrico de (1.35) encontramos que,

$$\vec{E}_{lm}^{(TE)} = Zf_l(qr)\vec{L}Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.36)$$

El campo magnético se puede escribir en términos del campo eléctrico como

$$\vec{H}_{lm}^{(TE)} = -\frac{i}{qZ}\vec{\nabla} \times \vec{E}_{lm}^{(TE)} \quad (1.37)$$

Definiendo un campo eléctrico multipolar o transversal magnético (TM) de orden (l, m) como:

$$\vec{H}_{lm}^{(TM)} = f_l(qr)\vec{L}Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.38)$$

$$\vec{E}_{lm}^{(TM)} = \frac{iZ}{q}\vec{\nabla} \times \vec{H}_{lm}^{(TM)} \quad (1.39)$$

Como la solución más general para los campos electromagnéticos es una superposición de todas las soluciones multipolares considerando ambas polarizaciones tenemos

$$\vec{H}(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ b_{lm} f_l(qr) \vec{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{i}{q} a_{lm} \vec{\nabla} \times [f_l(qr) \vec{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\} \quad (1.40)$$

$$\vec{E}(\vec{r}) = Z \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ a_{lm} f_l(qr) \vec{X}_{lm}(\theta, \varphi) + \frac{i}{q} b_{lm} \vec{\nabla} \times [f_l(qr) \vec{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\} \quad (1.41)$$

donde se ha introducido el vector armónico esférico normalizado de orden (l, m)

$$\vec{X}_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \vec{L}Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.42)$$

El desarrollo del rotacional que aparece en las ecs. 1.40 y 1.41 es

$$\vec{\nabla} \times f(qr)\bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) = i\sqrt{l(l+1)}Y_{lm}(\theta, \varphi)\frac{f_l(qr)}{r}\hat{r} + \frac{[rf_l(qr)]}{r}\hat{r} \times \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.43)$$

Usando el resultado (1.43), los campos se pueden escribir como

$$\vec{H} = \sum_{l,m}^{\infty} \left\{ b_{lm}f_l(qr)\bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{ia_{lm}}{q}\frac{[rf_l(qr)]}{r}\hat{r} \times \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) + \frac{a_{lm}}{q}\sqrt{l(l+1)}Y_{lm}(\theta, \varphi)\frac{f_l(qr)}{r}\hat{r} \right\} \quad (1.44)$$

$$\vec{E} = Z \sum_{l,m}^{\infty} \left\{ a_{lm}f_l(qr)\bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) + \frac{ib_{lm}}{q}\frac{[rf_l(qr)]}{r}\hat{r} \times \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{b_{lm}}{q}\sqrt{l(l+1)}Y_{lm}(\theta, \varphi)\frac{f_l(qr)}{r}\hat{r} \right\} \quad (1.45)$$

Los vectores cumplen con las siguientes propiedades de ortogonalidad:

$$\int \bar{X}_{l'm'}^* \cdot \bar{X}_{lm} d\Omega = \delta_{l'l'}\delta_{mm'}, \quad (1.46)$$

$$\int \bar{X}_{l'm'}^* \cdot (\vec{r} \times \bar{X}_{lm}) d\Omega = 0$$

Las proyecciones de los vectores armónicos esféricos sobre el eje-x y el eje-y son

$$\hat{x} \cdot \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{l(l+1)}} [\sqrt{(l-m)(l+m+1)}Y_{lm+1}(\theta, \varphi) + \sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{lm-1}(\theta, \varphi)] \quad (1.47)$$

$$\hat{y} \cdot \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2i\sqrt{l(l+1)}} [\sqrt{(l-m)(l+m+1)}Y_{lm+1}(\theta, \varphi) - \sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{lm-1}(\theta, \varphi)] \quad (1.48)$$

$$\hat{x} \cdot [\hat{r} \times \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] = \frac{1}{i\sqrt{l(l+1)}} \left(-\cos\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.49)$$

$$\hat{y} \cdot [\hat{r} \times \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] = \frac{i}{\sqrt{l(l+1)}} \left(\cos\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.50)$$

Los operadores diferenciales de ascenso y descenso son

$$L_+ = e^{+i\varphi} \left(+\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \quad (1.51)$$

$$L_- = e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \quad (1.52)$$

1.5 El Desarrollo Multipolar de una Onda Plana.

El campo magnético de una onda plana linealmente polarizada en la dirección x que viaja en la dirección z .

$$\vec{H}_i = h_o \exp(+i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}) \hat{x} \quad (1.53)$$

Aplicando el rotacional de campo magnético (1.53) y usando (1.14), obtenemos el campo eléctrico

$$\vec{E}_i = -\sqrt{\frac{\mu_1}{\epsilon_1}} \hat{z} \times \vec{H}_i = -\hat{y} Z_1 h_o \exp(iq_1 r \cos \theta) \quad (1.54)$$

Usando la ec. 10.45 de la ref. [35], la ecuación (1.53) puede escribir como

$$\vec{H}_i = h_o \hat{x} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(qr) Y_{l0}(\theta, \varphi) \quad (1.55)$$

En este problema hay, al menos, dos opciones: a) usar coordenadas esféricas debido a la partícula ó b) coordenadas cartesianas debido a la onda plana. Optaremos por la primera opción.

Reescribiremos el campo magnético de la onda incidente usando las relaciones entre la base de coordenadas cartesianas y esféricas

$$\hat{x} = \sin \theta \cos \varphi \hat{r} + \cos \theta \cos \varphi \hat{\theta} - \sin \varphi \hat{\phi} \quad (1.56)$$

$$\hat{y} = \sin \theta \sin \varphi \hat{r} + \cos \theta \sin \varphi \hat{\theta} + \cos \varphi \hat{\phi} \quad (1.57)$$

$$\hat{z} = \cos \theta \hat{r} - \sin \theta \hat{\theta} \quad (1.58)$$

Entonces, el campo magnético queda como:

$$\vec{H}_i(\vec{r}) = h_o (\sin \theta \cos \varphi \hat{r} + \cos \theta \cos \varphi \hat{\theta} - \sin \varphi \hat{\phi}) \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(qr) Y_{l0}(\theta, \varphi) \quad (1.59)$$

Escribiremos el campo magnético como un desarrollo multipolar de la forma de la ecuación (1.45), obtenemos:

$$h_o \hat{x} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(q_1 r) Y_{l0}(\theta, \varphi) = \sum_{l,m} [b_{lm} j_l(q_1 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{ia_{lm}}{q_1} \nabla \times j_l(q_1 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \quad (1.60)$$

Multiplicamos por $\bar{X}_{kp}^*(\theta, \varphi)$ el desarrollo multipolar del campo e integramos sobre el ángulo solido se obtiene

$$h_o \int \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(q_1 r) Y_{l0}(\theta, \varphi) d\Omega \hat{x} \cdot \bar{X}_{kp}^*(\theta, \varphi) = \sum_{k,m} \{ b_{lm} j_l(q_1 r) \int \bar{X}_{kp}^*(\theta, \varphi) \cdot \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{i}{q_1} a_{lm} \int \bar{X}_{kp}^*(\theta, \varphi) \cdot [i \sqrt{l(l+1)} \frac{j_l(q_1 r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \hat{r} + \frac{[r j_l(q_1 r)]'}{r} \hat{r} \times \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \} d\Omega \quad (1.61)$$

Aplicando las propiedades de ortonormalidad ecuaciones (1.46) se obtiene:

$$b_{lm} j_l(q_1 r) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(q_1 r) h_o \int Y_{l0}(\theta, \varphi) \hat{x} \cdot \bar{X}_{kp}^*(\theta, \varphi) d\Omega \quad (1.62)$$

Usando el resultado dado por (1.47) y la ortogonalidad de los armónicos esféricos

$$b_{lm} j_l(q_1 r) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2\sqrt{k(k+1)}} j_l(q_1 r) h_o [\sqrt{(k+m)(k-m+1)} \delta_{lk} \delta_{-m+1,0} + \sqrt{(k-m)(k+m+1)} \delta_{lk} \delta_{-m-1,0}] \quad (1.63)$$

La ec. 1.63 establece que solo dos coeficientes son diferentes de cero

$$b_{l,-1} = i^l h_o \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2} \quad (1.64)$$

y

$$b_{l,+1} = i^l h_o \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2}. \quad (1.65)$$

Haciendo un procedimiento análogo usando el campo eléctrico obtenemos

$$a_{lm} j_l(q_1 r) Z_1 = \int \bar{E}(r) \cdot \bar{X}_{kp}^*(\theta, \varphi) d\Omega \quad (1.66)$$

Si ahora sustituimos el campo eléctrico ec. (1.54) en (1.66), además del resultado dado por (1.48) se encuentran los coeficientes

$$a_{l,+1} = +i^{l+1} h_o \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2} \quad (1.67)$$

y

$$a_{l,-1} = -i^{l+1} h_0 \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2} \quad (1.68)$$

Dos puntos que destacar de los coeficientes son

1. La primera observación es que sólo hay dos valores de m distintos de cero para cada coeficiente que son +1 y -1.
2. La segunda es que los coeficientes b y a son simétricos y anti simétricos respecto a m , respectivamente

Finalmente, el desarrollo multipolar del campo incidente es de la forma:

$$\begin{aligned} \vec{E}^i = Z_1 \sum_l \left\{ a_{l1}^i j_l(q_1 r) [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) - \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] + \frac{ib_{l1}^i [r j_l(q_1 r)]}{q_1 r} \hat{r} \times [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) + \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] \right. \\ \left. - \frac{b_{l1}^i}{q_1} \sqrt{l(l+1)} [Y_{l,+1}(\theta, \varphi) + Y_{l,-1}(\theta, \varphi)] \frac{j_l(q_1 r)}{r} \hat{r} \right\} \end{aligned} \quad (1.69)$$

$$\begin{aligned} \vec{H}^i = \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ b_{l1}^i j_l(q_1 r) [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) + \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] - \frac{ia_{l1}^i [r j_l(q_1 r)]}{q_1 r} \hat{r} \times [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) - \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] \right. \\ \left. + \frac{a_{l1}^i}{q_1} \sqrt{l(l+1)} [Y_{l,+1}(\theta, \varphi) - Y_{l,-1}(\theta, \varphi)] \frac{j_l(q_1 r)}{r} \hat{r} \right\} \end{aligned} \quad (1.70)$$

1.6 Teoría de Mie

El fenómeno conocido como difracción de las ondas electromagnéticas consiste en el cambio de dirección de las ondas puede ser debido a un obstáculo o cuando atraviesa una rendija, etc. La difracción es la interferencia de una superposición de ondas y no es posible describirla en término de las leyes de la óptica geométrica.

En la óptica geométrica se representa una onda electromagnética con un rayo, si éstas leyes se cumplieran para explicar el esparcimiento existirían regiones de sombra con límites bien definidos que las separarían de las regiones iluminadas, sin embargo en la realidad se encuentra

una complicada distribución de luz. La óptica geométrica se cumple sólo cuando las ranuras o los obstáculos son mayores que la longitud de onda con las que se trabaja.

Gustav Mie en el año de 1908 estudiando coloides encontró una solución exacta al esparcimiento de la luz debido a la presencia de una esfera de radio a , a los resultados se le conocen como la solución o teoría de Mie. [2]

Paul Debye resolvió un problema equivalente, donde el interés del trabajo era el estudio de la presión de radiación debido a la luz sobre un conductor esférico, esto se leyó en el clásico libro de H.C van de Hulst, *Light Scattering by small Particles* [38]. Este trabajo le dió el grado de Doctor asesorado por Arnold Sommerfeld. La solución de Mie aparece en textos cuyos autores principales son van de Hulst[38], Born y Wolf [39], Borhen y Huffman [40].

Consideremos una onda electromagnética plana monocromática de polarización lineal a lo largo del eje y con dirección de propagación \hat{z} incidiendo sobre la esfera de radio a como se muestra en la Figura 1. Gustav Mie fue el primero en resolver analíticamente y de forma exacta éste problema, sin embargo ya existía interés y trabajos para partículas. Maxwell Garnett estudió las propiedades ópticas en metales usando la fórmula de Lorentz. [39]

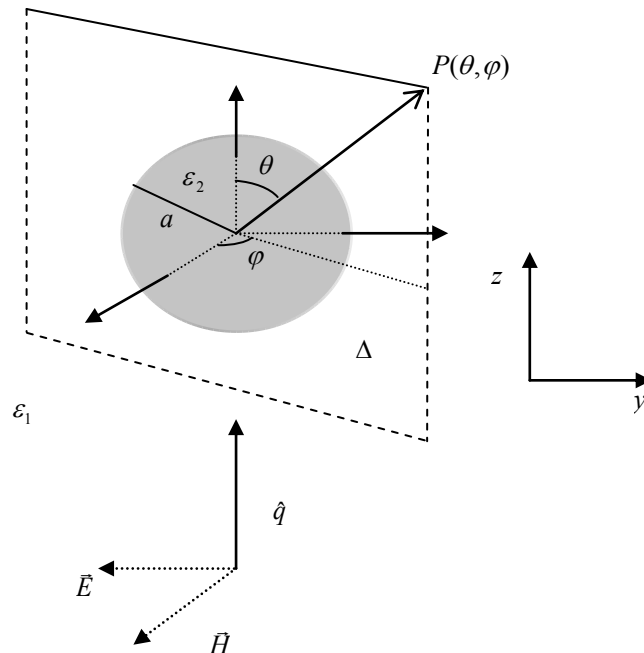


Figura 2 El sistema consiste en una onda plana monocromática linealmente polarizada en la dirección y e incidiendo con dirección z en un medio con constante

dieléctrica ε_1 sobre una esfera de radio a de constante dieléctrica ε_2 . Δ es el plano de esparcimiento que contiene el vector de la onda incidente \vec{q}_i y un vector de observación (θ, φ) .

En el sistema a estudiar tenemos un campo dentro de la esfera, y fuera de ella se tienen el campo incidente y el esparcido. Cada uno de los campos debe de cumplir la física del problema: dentro de la esfera los campos no pueden divergir, entonces la función $f_l(qr) = j_l(q_2r)$ es una Bessel esférica. El campo esparcido se debe comportar como una onda viajera, por lo tanto $f_l(qr) = h_l^{(1)}(q_2r)$ debe de ser una Hankel esférica. A continuación mostramos la forma de los campos para las ondas electromagnéticas en cuestión; los campos dentro de la esfera

$$\begin{aligned} \vec{E}^e = Z_2 \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ a_{l1}^e j_l(q_e r) [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) - \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] + \frac{ib_{l1}^e [rj_l(q_e r)]}{q_e r} \hat{r} \times [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) + \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] \right. \\ \left. - \frac{b_{l1}^e}{q_e} \sqrt{l(l+1)} [Y_{l,+1}(\theta, \varphi) + Y_{l,-1}(\theta, \varphi)] \frac{j_l(q_e r)}{r} \hat{r} \right\} \end{aligned} \quad (1.71)$$

$$\begin{aligned} \vec{H}^e = \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ b_{l1}^e j_l(q_e r) [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) + \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] - \frac{ia_{l1}^e [rj_l(q_e r)]}{q_e r} \hat{r} \times [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) - \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] \right. \\ \left. + \frac{a_{l1}^e}{q_e} \sqrt{l(l+1)} [Y_{l,+1}(\theta, \varphi) - Y_{l,-1}(\theta, \varphi)] \frac{j_l(q_e r)}{r} \hat{r} \right\} \end{aligned} \quad (1.72)$$

Y fuera de la esfera

$$\begin{aligned} \vec{E}^s = \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ b_{l1}^s h_l^{(1)}(q_1 r) [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) + \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] - \frac{ia_{l1}^s [rh_l^{(1)}(q_1 r)]}{q_1 r} \hat{r} \times [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) - \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] \right. \\ \left. + \frac{a_{l1}^s}{q_1} \sqrt{l(l+1)} [Y_{l,+1}(\theta, \varphi) - Y_{l,-1}(\theta, \varphi)] \frac{h_l^{(1)}(q_1 r)}{r} \hat{r} \right\} \end{aligned} \quad (1.73)$$

$$\begin{aligned} \vec{H}^s = \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ b_{l1}^s h_l^{(1)}(q_1 r) [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) + \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] - \frac{ia_{l1}^s [rh_l^{(1)}(q_1 r)]}{q_1 r} \hat{r} \times [\bar{X}_{l,+1}(\theta, \varphi) - \bar{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)] \right. \\ \left. + \frac{a_{l1}^s}{q_1} \sqrt{l(l+1)} [Y_{l,+1}(\theta, \varphi) - Y_{l,-1}(\theta, \varphi)] \frac{h_l^{(1)}(q_1 r)}{r} \hat{r} \right\} \end{aligned} \quad (1.74)$$

Debido a la simetría del problema se ha omitido la suma sobre m .

Las ecuaciones (1.11) evaluada en $r = a$ son las condiciones de frontera que se aplican a la esfera. Solo hay que cambiar el vector normal por el vector unitario radial, es decir

$$(\varepsilon_2 \vec{E}^e - \varepsilon_1 \vec{E}^s) \cdot \hat{r} = \varepsilon_1 \vec{E}^i \cdot \hat{r} \quad (1.75a)$$

$$(\mu_2 \vec{B}^e - \mu_1 \vec{B}^s) \cdot \hat{r} = \mu_1 \vec{B}^i \cdot \hat{r} \quad (1.75b)$$

$$(\vec{E}^e - \vec{E}^s) \times \hat{r} = \vec{E}^i \times \hat{r} \quad (1.75c)$$

$$(\vec{H}^e - \vec{H}^s) \times \hat{r} = \vec{H}^i \times \hat{r} \quad (1.75d)$$

Hay que notar que en esta geometría, las componentes tangenciales de los campos están relacionadas con $\vec{X}_{l,m}(\theta, \varphi) \times \hat{r}$ y con $\hat{r} \times \vec{X}_{l,m}(\theta, \varphi) \times \hat{r} = +\vec{X}_{l,m}(\theta, \varphi)$, lo cual será de utilidad al calcular los coeficientes.

Sustituyendo los campos eléctricos (1.71), (1.73) y (1.69) en (1.75c), realizando el producto escalar con $[\hat{r} \times \vec{X}_{l,m}^*(\theta, \varphi)]$, integrando sobre todo el ángulo sólido y aprovechando las propiedades de ortonormalidad [1.46] obtenemos:

$$Z_e a_{l1}^e j_l(q_e a) - Z_1 a_{l1}^s h_l^{(1)}(q_1 a) = Z_1 a_{l1}^i j_l(q_1 a) \quad (1.76)$$

Sustituyendo los campos magnéticos (1.72), (1.74) y (1.70) en (1.75d) y realizando el producto escalar con $[\vec{X}_{l,m}^*(\theta, \varphi)]$ e integrando sobre todo el ángulo sólido y aprovechando las propiedades de ortonormalidad [1.46] obtenemos:

$$\frac{1}{q_e} a_{l1}^e \frac{d}{dr} [r j_l(q_e r)]_{r=a} - \frac{1}{q_1} a_{l1}^s \frac{d}{dr} [r h_l^{(1)}(q_1 r)]_{r=a} = a_{l1}^i \frac{d}{dr} [r j_l(q_1 r)]_{r=a} \quad (1.77)$$

Al despejar a_{l1}^e de la ecuación (1.76) y sustituirla en (1.77) encontramos que

$$a_{l1}^s = a_{l1}^i \frac{K_e \frac{d}{dr}[rj_l(q_1 r)]_{r=a} j_l(q_e a) - K_1 j_l(q_1 a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a}}{K_1 h_l^{(1)}(q_1 a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a} - K_e j_l(q_e a) \frac{d}{dr}[r h_l^{(1)}(q_1 r)]_{r=a}} \quad (1.78)$$

Sustituyendo los campos magnéticos (1.72), (1.74) y (1.70) en (1.75d) y realizando el producto escalar con $[\hat{r} \times \bar{X}_{l'm}^*(\theta, \varphi)]$ e integrando sobre todo el ángulo sólido y aprovechando las propiedades de ortonormalidad [1.46] obtenemos:

$$b_{l1}^e j_l(q_e a) - b_{l1}^s h_l^{(1)}(q_1 a) - b_{l1}^i j_l(q_1 a) = 0 \quad (1.79)$$

Sustituyendo los campos eléctricos (1.71), (1.73) y (1.69) en (1.75c) y realizando el producto escalar con $[\bar{X}_{l'm}^*(\theta, \varphi)]$ e integrando sobre todo el ángulo sólido y aprovechando las propiedades de ortonormalidad [1.46] obtenemos:

$$\frac{Z_e}{q_e} b_{l1}^e \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a} - \frac{Z_1}{q_1} b_{l1}^s \frac{d}{dr}[r h_l^{(1)}(q_1 r)]_{r=a} = \frac{Z_1}{q_1} b_{l1}^i \frac{d}{dr}[rj_l(q_1 r)]_{r=a} \quad (1.80)$$

Al despejar b_{l1}^e de la ecuación (1.79) y sustituirla en (1.80) encontramos que

$$b_{l1}^e = -b_{l1}^i \frac{K_e q_1^2 j_l(q_1 a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a} - K_1 q_e^2 j_l(q_e a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_1 r)]_{r=a}}{K_e q_1^2 h_l^{(1)}(q_1 a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a} - K_1 q_e^2 j_l(q_e a) \frac{d}{dr}[r h_l^{(1)}(q_1 r)]_{r=a}} \quad (1.81)$$

Donde K_e y K_1 son las permitividades magnéticas relativas de la esfera y del medio que la rodea respectivamente.

Los coeficientes dentro de la esfera son:

$$b_{l1}^e = -b_{l1}^i \frac{q_e}{q_1} \frac{K_1 q_1^2 j_l(q_1 a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a} - K_2 q_1^2 j_l(q_e a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_1 r)]_{r=a}}{K_e q_1^2 h_l^{(1)}(q_1 a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a} - K_1 q_e^2 j_l(q_e a) \frac{d}{dr}[r h_l^{(1)}(q_1 r)]_{r=a}} \quad (1.82)$$

$$a_{l1}^e = a_{l1}^i \frac{q_e}{q_1} \frac{K_1 \frac{d}{dr}[rj_l(q_1 r)]_{r=a} j_l(q_e a) - K_1 h_l^{(1)}(q_1 r) \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a}}{K_1 h_l^{(1)}(q_1 a) \frac{d}{dr}[rj_l(q_e r)]_{r=a} - K_e j_l(q_e a) \frac{d}{dr}[r h_l^{(1)}(q_1 r)]_{r=a}} \quad (1.83)$$

Los campos electromagnéticos dentro de las nanopartículas metálicas han tenido poca atención por parte de los científicos, ya que, no es posible medir experimentalmente los acoplamientos de los campos directamente dentro del material.

El acoplamiento entre los plasmones con otros sistemas electrónicos, por ejemplo, SERS es un acoplamiento con los campos externos cercanos, sin embargo en la óptica no lineal los campos internos son sumamente relevantes. [34]

1.7 Las Secciones Eficaces Total, Esparcida y Absorbida.

La sección eficaz de esparcimiento de la esfera [40], usando la ecuación (1.24) es:

$$\sigma_s = \frac{2\pi}{q_1^2} \sum_{l=1} (2l+1) [|a_{l1}^s|^2 + |b_{l1}^s|^2] \quad (1.84)$$

La sección eficaz de absorción σ_{abs} se define como

$$\sigma_{abs} = \frac{R^2}{2I_i} \text{Re} \left\{ \int \hat{r} \cdot (\vec{E} \times \vec{H}^*) d\Omega \right\} \quad (1.85)$$

donde \vec{E} y \vec{H} son los campos en el exterior de la esfera. Al desarrollar la ecuación (1.85) se puede obtener

$$\sigma_{abs} = \frac{2\pi}{q_1^2} \sum_{l=1} (2l+1) \{ \text{Re}[a_{l1}^s + b_{l1}^s] - |a_{l1}^s|^2 - |b_{l1}^s|^2 \} \quad (1.86)$$

La sección eficaz de extinción es la suma de las secciones eficaces de esparcimiento y de la absorción

$$\sigma_{ext} = \frac{2\pi}{q_1^2} \sum_{l=1} (2l+1) \text{Re}[a_{l1}^s + b_{l1}^s] \quad (1.87)$$

Como lo hemos mencionado anteriormente existen resonancias, pueden ser plasmones o WGM para el caso de la esfera, esto se manifiesta en un máximo o máximos en la sección eficaz de extinción. Cuando no hay absorción en la esfera la sección eficaz de extinción es igual a la sección eficaz de esparcimiento.

En algunos textos [40] a las ecuaciones [1.84, 1.86, 1.87] le llaman eficiencia de esparcimiento, de absorción y de extinción respectivamente.

1.8 Modelo de Drude

P. H. Drude (1900) fue el primero que se aventuró a usar la idea que un “gas” de electrones que se movía libremente entre los iones usando las leyes de la teoría cinética clásica, para explicar las propiedades de los metales.

En forma breve su teoría se base en las siguientes consideraciones:

- a) No hay interacción electrón-electrón ni electrón –ion, solo hay choques elásticos con los iones.
- b) Las colisiones son eventos instantáneos que cambian de manera abrupta la velocidad de un electrón.
- c) Un electrón experimenta una colisión con una probabilidad por unidad de tiempo $1/\tau$ (aproximación de tiempo de relajación). La probabilidad de que el electrón sufra una colisión en un intervalo de tiempo infinitesimal de longitud dt/τ .
- d) Los electrones alcanzan el equilibrio térmico con sus alrededores solo a través de colisiones.

Bajo las consideraciones anteriores y usando la segunda ley de Newton, la ecuación del movimiento es:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -m\Gamma \frac{d\vec{r}}{dt} - e\vec{E}_{loc} \quad (1.88)$$

Donde e es la carga del electrón, \vec{E}_{loc} es el campo local. El segundo término de la ecuación anterior está asociado a la absorción del medio y representa el tiempo medio de colisión.

Tomando que el comportamiento temporal del campo local es $e^{-i\omega t}$ la ecuación (1.88) toma la forma

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m\Gamma \frac{d\vec{r}}{dt} = -e\vec{E}_{loc} e^{-i\omega t} \quad (1.89)$$

La solución espacial a la ecuación (1.88) es

$$\vec{r} = \frac{e}{m} \frac{\vec{E}_{loc}}{\omega^2 + i\Gamma\omega} \quad (1.90)$$

El momento dipolar inducido es

$$\vec{p} = -\frac{e^2}{m} \frac{\vec{E}_{loc}}{\omega^2 + i\Gamma\omega} \quad (1.91)$$

Si hay N átomos por unidad de volumen, la polarizabilidad o polarización macroscópica es

$$\vec{P} = N \langle \vec{p} \rangle \quad (1.92)$$

Tomando la ecuación (1.5) el desplazamiento eléctrico queda como

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} = \epsilon_o \vec{E} + \vec{P} \quad (1.93)$$

Por comparación obtenemos

$$\frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_o} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma\omega} \quad (1.94)$$

Donde ω_p es la frecuencia de plasma y ϵ_o es la constante dieléctrica del vacío.

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{m\epsilon_o} \quad (1.95)$$

Tomando el modelo de Drude y considerando que el tiempo de colisión de los electrones es grande comparada con la velocidad angular de la onda incidente tenemos:

$$\frac{\epsilon}{\epsilon_o} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (1.96)$$

Despejando la constante dieléctrica de la ecuación (1.96) y sustituyéndola en (1.16) obtenemos

$$\omega^2 = \omega_p^2 + c^2 q^2 \quad (1.97)$$

Hemos encontrado una relación entre las frecuencias de excitación ω con el número de onda q . Se le llaman plasmones de volumen a las partículas que cumplen con la ecuación (1.97)

Las propiedades ópticas de los sólidos están incluidas en la constante dieléctrica $\epsilon(\omega)$, esta contiene la información de las excitaciones elementales, en la aproximación de límite de onda grande, con las cuales campos electromagnéticos están asociadas.

Capítulo 2

Una Extensión a la Teoría de Mie.

En este capítulo se presenta el desarrollo teórico para resolver el problema del esparcimiento de ondas electromagnéticas producido por una esfera cerca de una superficie plana que divide a dos medios semi-infinitos haciendo con ello una extensión a la teoría de Mie. Este problema cobra relevancia ya que en algunos estudios las esferas se encuentran muy cerca o sobre una superficie. En la introducción se estableció que la respuesta óptica de este sistema cambia con respecto a la esfera aislada. El planteamiento matemático se complica debido a que las condiciones de frontera en la esfera y en el plano se deben de satisfacer simultáneamente, y estos dos sistemas representan geometrías distintas.

En la actualidad dispositivos donde hay una o un conjunto de partículas cerca de una superficie o sustrato son cada vez más estudiados, debido a las aplicaciones tecnológicas que poseen. Por ejemplo: en la climatología, evolución estelar, óptica de fractales, óptica no lineal, en energía limpia, procesos de diagnóstico, sensores y en la nanolitografía.

2.1 El Sistema Esfera-Plano

Imaginemos que el medio 1 de la figura 1.1 del capítulo anterior se corta de forma perpendicular a la dirección de propagación de la onda incidente, formando así dos medios semi-infinitos con constantes dieléctricas ε_1 (medio 1, $z < 0$) y ε_2 (medio 2, $z > 0$ y $r > a$), y una esfera rodeada por el medio 2 con constante dieléctrica ε_e .

Se considera una onda electromagnética plana con polarización lineal, cuyo campo magnético oscila a lo largo del eje- x , que incide de forma normal a la superficie, ver figura 2.1. Esta onda en representación de coordenadas cartesianas esta descrita por las ecuaciones (1.53) y (1.54) y en expansión multipolar por (1.69) y (1.79).

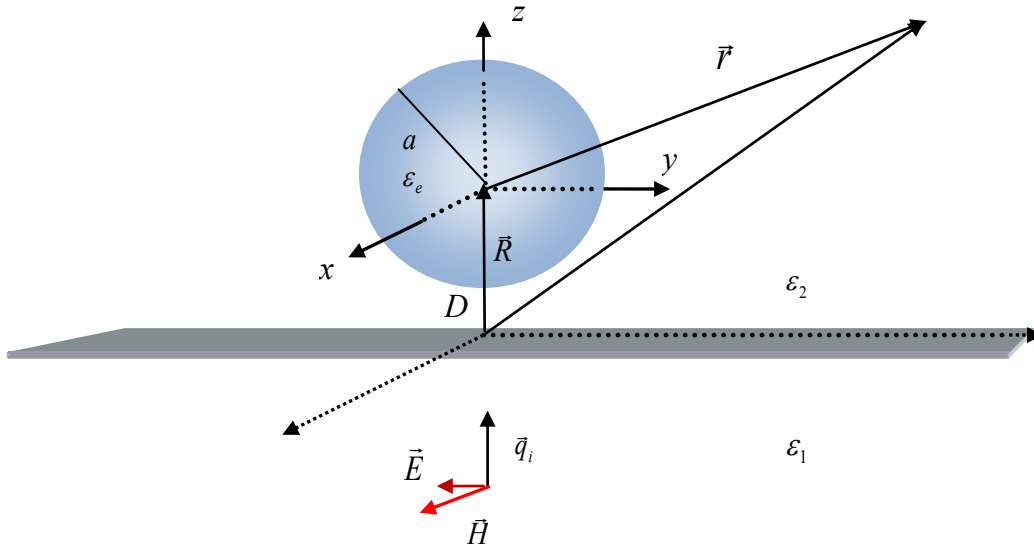


Figura 2.1 Una esfera de radio a con una permitividad ϵ_e está a una distancia D de un plano infinito que divide a dos regiones con permitividades ϵ_1 y ϵ_2 . Así

$\vec{R} = -(D + a)\hat{z}$ es el vector que localiza al plano medido desde el centro de la esfera, que es el origen de coordenadas. Se le hace incidir una onda plana linealmente polarizada, con una dirección de propagación z desde la región con permitividad ϵ_1 .

La onda incidente al llegar al plano se reflejará y otra se transmitirá al segundo medio en donde se esparcirá debido a la presencia de la esfera (habrán además campos en el interior de la esfera producto de la interacción con el campo transmitido), después el campo esparcido interactuará con el plano y el haz reflejado de este incidirá sobre la esfera de nuevo.

Para resolver el problema dividiremos el espacio en tres regiones:

Para la región $z < 0$, existe el campo electromagnético esparcido por la esfera real y que se propaga en el medio 1; el campo eléctrico y el magnético son,

$$\vec{E}^r(\vec{r}) = Z_1 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ a_{lm}^r h_l^{(1)}(q_1 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) + \frac{i}{q_1} b_{lm}^r \vec{\nabla} \times [h_l^{(1)}(q_1 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\} \quad (2.1)$$

$$\vec{H}^r(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ b_{lm}^r h_l^{(1)}(q_1 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{i}{q_1} a_{lm}^r \vec{\nabla} \times [h_l^{(1)}(q_1 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\} \quad (2.2)$$

En este caso no se puede omitir la sumatoria en m , ya que el plano rompe la simetría esférica.

Para la región $z > 0$ y $r > a$, se encuentra el campo difractado por la esfera real y que se propaga en el medio 2; los campos eléctrico y magnético son

$$\vec{E}^s(\vec{r}) = Z_2 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ a_{lm}^s h_l^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) + \frac{i}{q_2} b_{lm}^s \vec{\nabla} \times [h_l^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\} \quad (2.3)$$

$$\vec{H}^s(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ b_{lm}^s h_l^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{i}{q_2} a_{lm}^s \vec{\nabla} \times [h_l^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\} \quad (2.4)$$

Existe otra onda que es esparcida por una esfera “imaginaria” que está a una distancia $2(a+D)$ de la esfera real, los campos eléctrico y magnético son

$$\vec{E}^t(\vec{r}') = Z_2 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ a_{lm}^t h_l^{(1)}(q_2 r') \bar{X}_{lm}(\theta', \varphi') + \frac{i}{q_2} b_{lm}^t \vec{\nabla} \times [h_l^{(1)}(q_2 r') \bar{X}_{lm}(\theta', \varphi')] \right\} \quad (2.5)$$

$$\vec{H}^t(\vec{r}') = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ b_{lm}^t h_l^{(1)}(q_2 r') \bar{X}_{lm}(\theta', \varphi') - \frac{i}{q_2} a_{lm}^t \vec{\nabla} \times [h_l^{(1)}(q_2 r') \bar{X}_{lm}(\theta', \varphi')] \right\} \quad (2.6)$$

Dentro de la esfera, es decir la región $z > 0$ y $r < a$, los campos eléctrico y magnético son

$$\vec{E}^e(\vec{r}) = Z_e \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ a_{lm}^e j_l(q_e r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) + \frac{i}{q_e} b_{lm}^e \vec{\nabla} \times [j_l(q_e r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\} \quad (2.7)$$

$$\vec{H}^e(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ b_{lm}^e j_l(q_e r) \vec{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{i}{q_e} a_{lm}^e \vec{\nabla} \times [j_l(q_e r) \vec{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\} \quad (2.8)$$

Las funciones Bessel fueron escogidas en base a los criterios establecidos en el capítulo 1.

Los campos deben satisfacer condiciones en la frontera de la esfera, en $r = a$:

$$(\vec{E}^e - \vec{E}^s - \vec{E}^t) \times \hat{r} = 0 \quad (2.9)$$

$$(\vec{H}^e - \vec{H}^s - \vec{H}^t) \times \hat{r} = 0 \quad (2.10)$$

Las condiciones de frontera en el plano $z = -(a + D)$ son:

$$(\vec{E}^r + \vec{E}^i - \vec{E}^s - \vec{E}^t) \times \hat{z} = 0 \quad (2.11)$$

$$(\vec{H}^r + \vec{H}^i - \vec{H}^s - \vec{H}^t) \times \hat{z} = 0 \quad (2.12)$$

Antes de sustituir los campos en las condiciones de frontera, estableceremos el teorema de adición traslación para los vectores esféricos armónicos.

2.2 Teorema de Adición-Traslación para Ondas Esféricas Vectoriales

Para poder evaluar el campo expresado en su forma multipolar en la superficie plana y hacer las consideraciones que hemos expuesto en la sección 2.1, es necesario usar el teorema de la adición-traslación para ondas esféricas vectoriales, que establece una regla matemática para que los campos se puedan reescribir en término de cualquier origen de coordenadas.

El teorema surge debido al interés de estudiar el esparcimiento de varias esferas. Friedman y Russek en 1954 derivan el teorema de la adición-traslación para ondas esféricas escalares.

Stein en 1961 y Cruzan en 1962 presentan el teorema de la adición-traslación para ondas esféricas vectoriales. El teorema depende de los coeficientes de Clebsh-Gordan y éstos ya se habían obtenido 100 años antes. [42] Este teorema fue aplicado al estudio de plasmones en arreglos de esferas metálicas [1]

El teorema de la adición para ondas esféricas establece:

$$h_l^{(1)}(q_2 r') \bar{X}_{lm}(\theta', \varphi') = \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} \{C_n^{(l,m)} j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) + D_n^{(l,m)} \frac{1}{q_2} \nabla \times j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi)\} \quad (2.13)$$

$$\frac{1}{q_2} \nabla \times h_l^{(1)}(q_2 r') \bar{X}_{lm}(\theta', \varphi') = \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} \{D_n^{(l,m)} j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) + C_n^{(l,m)} \frac{1}{q_2} \nabla \times j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi)\} \quad (2.14)$$

donde θ' y φ' son los ángulos medidos desde el sistema primado, mientras que θ y φ son los ángulos medidos desde el sistema no-primado de la figura 2.2. La comprobación del teorema no es el objetivo de la tesis.

En los artículos la forma del teorema está expresada en otra base, como elegimos la notación de la referencia [35] se ha modificado de tal manera que fuera equivalente.

Los coeficientes $C_n^{(l,m)}$ y $D_n^{(l,m)}$ en las ecuaciones (2.13) y (2.14) están dadas por las ecuaciones (2.15) y (2.16), estas últimas fueron tomados de la referencia [21].

La relación de recurrencia para obtener los coeficientes es:

$$\begin{aligned}
c_n^{(+0,0)} &= +(-1)^n (2n+1)^{1/2} h_n^{(1)} [2q_2(a+D)] \\
c_n^{(-1,0)} &= -(-1)^l (2n+1)^{1/2} h_n^{(1)} [2q_2(a+D)] \\
C_n^{(l,m)} &= c_n^{(l,m)} - \frac{2q_2(a+D)}{2n+3} \frac{n+m+1}{n+1} c_{n+1}^{(l,m)} - \frac{2q_2(a+D)}{2n-1} \frac{n-m}{n} c_{n-1}^{(l,m)} \\
D_n^{(l,m)} &= -\frac{2iq_2(a+D)}{n(n+1)} m c_n^{(l,m)}
\end{aligned} \tag{2.15}$$

$$\begin{aligned}
c_n^{(l,+m)} &= c_n^{(l,-m)} \\
lc_n^{(l-1,0)} \sqrt{\frac{2n+1}{2l-1}} - (l+1)c_n^{(l+1,0)} \sqrt{\frac{2n+1}{2l+3}} &= (n+1)c_{n+1}^{(l,0)} \sqrt{\frac{2l+1}{2n+3}} - nc_{n-1}^{(l,0)} \sqrt{\frac{2l+1}{2n-1}}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

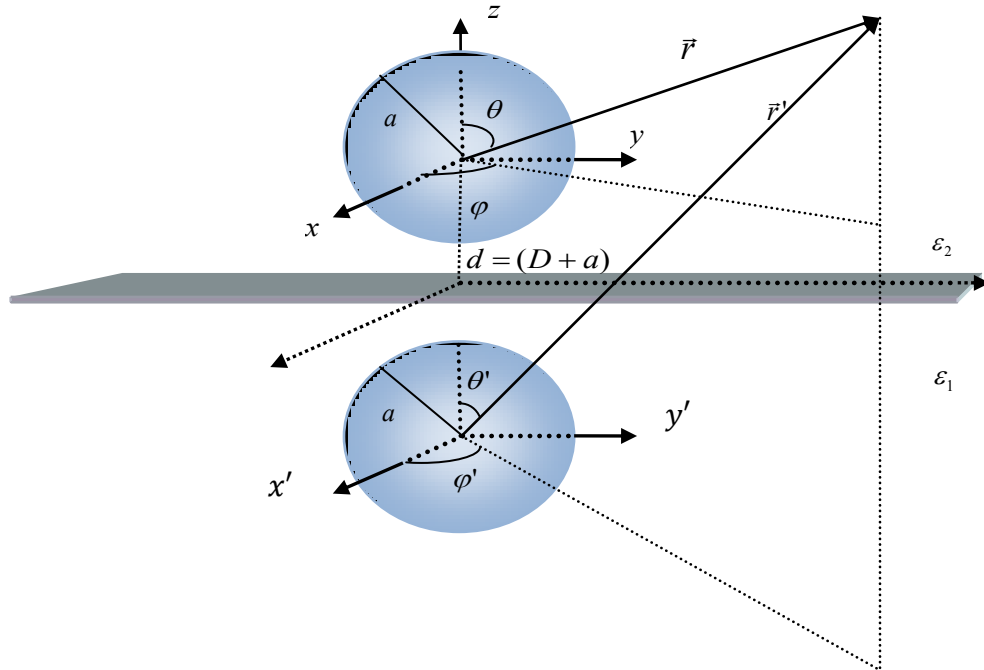


Figura 2.2. En el esquema se muestra la esfera real localizada en $z > 0$ a una distancia $+D$ del plano y la esfera imaginaria en la región $z < 0$ a una distancia $-D$ del plano. La esfera imagen en encuentra trasladada una distancia $2(a+D)$ de la esfera real.

El teorema de adición-traslación permitirá usar las propiedades de ortogonalidad de los vectores esféricos armónicos.

2.3 Aplicación del Teorema de Adición-Traslación en el Problema Esfera-Plano.

En esta sección usaremos el teorema de adición-traslación para escribir los campos esparcidos por la esfera imaginaria en términos de funciones Bessel y esféricos armónicos vectoriales en el origen de coordenadas de la esfera real. Una vez hecho esto, usaremos las condiciones de frontera satisfechas por los campos en el borde de la esfera para escribir las amplitudes de los campos esparcido por la esfera real en función de las amplitudes de los campos esparcidos por la esfera imaginaria. El formalismo empleado en esta parte es igual al planteado en el capítulo 1.

Aplicando el teorema de adición-traslación los campos esparcido por la esfera imaginaria ecs. (2.5) y (2.6), estas se pueden reescribir como

$$\begin{aligned} \bar{H}^t(\bar{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ \frac{b_{lm}^t}{\sqrt{l(l+1)}} \left[\sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} \{ C_n^{(l,m)} j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) + \frac{D_n^{(l,m)}}{q_2} \nabla \times j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \} \right] \right. \\ \left. - i \frac{a_{lm}^t}{\sqrt{l(l+1)}} \left[\sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} \{ D_n^{(l,m)} j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) + \frac{C_n^{(l,m)}}{q_2} \nabla \times j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.17)$$

y

$$\begin{aligned} E^t(\bar{r}) = Z_2 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ \frac{a_{lm}^t}{\sqrt{l(l+1)}} \left[\sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} \{ C_n^{(l,m)} j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) + \frac{D_n^{(l,m)}}{q_2} \nabla \times j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \} \right] \right. \\ \left. + i \frac{b_{lm}^t}{\sqrt{l(l+1)}} \left[\sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} \{ D_n^{(l,m)} j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) + \frac{C_n^{(l,m)}}{q_2} \nabla \times j_n(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Ahora usaremos las condiciones en la frontera de la esfera $r = a$. Sustituyendo las ecuaciones (2.7), (2.3) y (2.18) en (2.9), luego realizando el producto escalar de la ecuación vectorial resultante con $[\hat{r} \times \bar{X}_{kj}^*(\theta, \varphi)]$, integrando en θ y φ sobre todo el ángulo sólido y aprovechando las propiedades de ortonormalidad [1.46] obtenemos:

$$\begin{aligned}
& Z_2 a_{kj}^s h_k^{(1)}(q_2 a) + Z_2 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=|m|}^l \sqrt{\frac{n(n+1)}{l(l+1)}} a_{lm}^t C_n^{(l,m)} j_n(q_2 a) \delta_{nk} \delta_{mj} \\
& + i Z_2 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=|m|}^l \sqrt{\frac{n(n+1)}{l(l+1)}} b_{lm}^t D_n^{(l,m)} j_n(q_2 a) \delta_{nk} \delta_{mj} = Z_e a_{kj}^e j_k(q_e a)
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Sumando con las deltas de Kronecker:

$$Z_2 a_{kj}^s h_k^{(1)}(q_2 a) + Z_2 \sum_{l=1}^{\infty} \sqrt{\frac{k(k+1)}{l(l+1)}} \{a_{lm}^t C_k^{(l,m)} + i b_{lm}^t D_k^{(l,m)}\} j_k(q_2 a) = Z_e a_{kj}^e j_k(q_e a). \tag{2.20}$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.7), (2.3) y (2.18) en (2.10), luego realizamos el producto escalar de la ecuación vectorial resultante con $[\vec{X}_{kj}^*(\theta, \varphi)]$, e integrando angularmente obtenemos:

$$\begin{aligned}
& \frac{Z_2}{q_2} b_{kj}^s [r h_k^{(1)}(q_2 r)]'_{r=a} + \frac{Z_2}{q_2} \sum_{l=1}^{\infty} \sqrt{\frac{k(k+1)}{l(l+1)}} \{b_{lm}^t C_k^{(l,m)} - i a_{lm}^t D_k^{(l,m)}\} [r j_k(q_2 r)]'_{r=a} \\
& = \frac{Z_e}{q_e} b_{kj}^e [r j_k(q_e r)]'_{r=a}
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.8), (2.4) y (2.17) en (2.10), hacemos el producto escalar de la ecuación vectorial resultante con $[\hat{r} \times \vec{X}_{kj}^*(\theta, \varphi)]$, integrando sobre todo el ángulo sólido y aprovechando las propiedades de ortonormalidad [1.46] obtenemos:

$$b_{kj}^s h_k^{(1)}(q_2 a) + \sum_{l=1}^{\infty} \sqrt{\frac{k(k+1)}{l(l+1)}} \{b_{lm}^t C_k^{(l,m)} - i a_{lm}^t D_k^{(l,m)}\} j_k(q_2 a) = b_{kj}^e j_k(q_e a) \tag{2.22}$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.8), (2.4) y (2.17) en (2.9), luego realizando el producto escalar de la ecuación vectorial resultante con $[\hat{r} \times \vec{X}_{kj}^*(\theta, \varphi)]$, integrando en θ y φ sobre todo el ángulo sólido obtenemos:

$$\frac{1}{q_2} a_{kj}^s [rh_k^{(1)}(q_2 r)]'_{r=a} + \frac{1}{q_2} \sum_{l=1}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} \{a_{lm}^t C_k^{(l,m)} + ib_{lm}^t D_k^{(l,m)}\} [rj_k(q_2 r)]'_{r=a} = \frac{1}{q_e} a_{kj}^e [rj_k(q_e r)]'_{r=a} \quad (2.23)$$

Despejando a_{kj}^e de la ecuación (2.20) y sustituyendo en (2.23) y haciendo un cambio de índices ($k \rightarrow l$ y $j \rightarrow m$) se encuentra que

$$a_{lm}^s = -\frac{\frac{Z_e}{q_2} [rj_l(q_2 r)]'_{r=a} j_l(q_e a) - \frac{Z_2}{q_e} j_l(q_2 a) [rj_l(q_e r)]'_{r=a}}{\frac{Z_e}{q_2} [rh_l^{(1)}(q_2 r)]'_{r=a} j_l(q_e a) - \frac{Z_2}{q_e} h_l^{(1)}(q_2 a) [rj_l(q_e r)]'_{r=a}} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} [a_{nm}^t C_l^{(n,m)} + ib_{nm}^t D_l^{(n,m)}]. \quad (2.24)$$

Despejando b_{kj}^e de la ecuación (2.21) y sustituyendo en (2.22) y haciendo un cambio de índices obtenemos:

$$b_{lm}^s = \frac{\frac{Z_e}{q_e} j_l(q_2 a) [rj_l(q_e r)]'_{r=a} - \frac{Z_2}{q_2} j_l(q_e a) [rj_l(q_2 r)]'_{r=a}}{\frac{Z_2}{q_2} j_l(q_e a) [rh_l^{(1)}(q_2 r)]'_{r=a} - \frac{Z_e}{q_e} h_l^{(1)}(q_2 a) [rj_l(q_e r)]'_{r=a}} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} \{b_{nm}^t C_l^{(n,m)} - ia_{nm}^t D_l^{(n,m)}\} \quad (2.25)$$

Rescribiendo las ecs. (2.24)

$$a_{lm}^s = a_l^{mie} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} [a_{nm}^t C_l^{(n,m)} + ib_{nm}^t D_l^{(n,m)}] \quad (2.26)$$

con

$$a_l^{mie} = \frac{\frac{Z_e}{q_2} [rj_l(q_2 r)]'_{r=a} j_l(q_e a) - \frac{Z_2}{q_e} j_l(q_2 a) [rj_l(q_e r)]'_{r=a}}{\frac{Z_e}{q_2} [rh_l^{(1)}(q_2 r)]'_{r=a} j_l(q_e a) - \frac{Z_2}{q_e} h_l^{(1)}(q_2 a) [rj_l(q_e r)]'_{r=a}} \quad (2.27)$$

Ahora reescribiendo la ec. (2.25),

$$b_{lm}^s = b_l^{mie} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} [b_{nm}^t C_l^{(n,m)} - ia_{nm}^t D_l^{(n,m)}] \quad (2.28)$$

con

$$b_l^{mie} = \frac{\frac{Z_e}{q_e} j_l(q_2 a) [r j_l(q_e r)]'_{r=a} - \frac{Z_2}{q_2} j_l(q_e a) [r j_l(q_2 r)]'_{r=a}}{\frac{Z_2}{q_2} j_l(q_e a) [r h_l^{(1)}(q_2 r)]'_{r=a} - \frac{Z_e}{q_e} h_l^{(1)}(q_2 a) [r j_l(q_e r)]'_{r=a}} \quad (2.29)$$

Hasta este momento hemos escrito una incógnita en función de otra, esto permitirá obtener un sistema de ecuaciones de acuerdo al número de ellas.

Las ecuaciones (2.26) y (2.28) indican que los coeficientes de esparcimiento son los coeficientes de Mie multiplicado por un factor.

Escribiremos el campo esparcido en términos de los coeficientes del campo transmitido. Sustituyendo las ecuaciones (2.26) y (2.28) en la ecuación (2.3) se tiene

$$\begin{aligned} \vec{E}^s(\mathbf{r}) = Z_2 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} h_l^{(1)}(q_2 r) a_l^{mie} [a_{nm}^t C_l^{(n,m)} + i b_{nm}^t D_l^{(n,m)}] \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} \frac{i}{q} b_l^{mie} [b_{nm}^t C_l^{(n,m)} - ia_{nm}^t D_l^{(n,m)}] \nabla \times h_l^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) \right\} \quad (2.30) \end{aligned}$$

Como la suma sobre n y l van desde 1 hasta el infinito y del hecho de que los índices son mudos, obtenemos que

$$\vec{E}^s(\mathbf{r}) = Z_2 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \sum_{l=1}^{\infty} \sqrt{\frac{n(n+1)}{l(l+1)}} \{ h_n(q_2 r) a_n^{mie} [a_{lm}^t C_n^{(l,m)} + i b_{lm}^t D_n^{(l,m)}] \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \quad (2.31)$$

$$+ \frac{i}{q_2} b_n^{mie} \left[b_{lm}^t C_n^{(l,m)} - i a_{lm}^t D_n^{(l,m)} \right] \nabla \times h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \}$$

Si se factorizan los coeficientes a_{lm} y b_{lm} , (2.31) es

$$\begin{aligned} \bar{E}^s(\mathbf{r}) = & Z_2 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \sum_{l=1}^{\infty} \sqrt{\frac{n(n+1)}{l(l+1)}} \left\{ a_{lm}^t \left[a_n^{mie} C_n^{(l,m)} h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \right. \right. \\ & + \frac{b_n^{mie}}{q_2} D_n^{(l,m)} \nabla \times h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \left. \right] + i b_{lm}^t \left[a_n^{mie} D_n^{(l,m)} h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \right. \\ & \left. \left. + \frac{b_n^{mie}}{q_2} C_n^{(l,m)} \nabla \times h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.26) y (2.28) en la ecuación (2.4) se tiene que

$$\begin{aligned} \bar{H}^s(\mathbf{r}) = & \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left\{ b_l^{mie} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} \left[b_{nm}^t C_l^{(n,m)} - i a_{nm}^t D_l^{(n,m)} \right] h_l^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) \right. \\ & \left. - \frac{i}{q_2} a_l^{mie} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{n(n+1)}} \left[a_{nm}^t C_l^{(n,m)} + i b_{nm}^t D_l^{(n,m)} \right] \nabla \times \left[h_l^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{lm}(\theta, \varphi) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.33)$$

Como la suma sobre n y l van desde 1 hasta el infinito y como son del hecho de que los índices son mudos reacomodando la ecuación (2.33) obtenemos:

$$\begin{aligned} \bar{H}^s(\mathbf{r}) = & \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \sum_{l=1}^{\infty} \sqrt{\frac{n(n+1)}{l(l+1)}} \left\{ b_{lm}^t \left[b_n^{mie} C_n^{(l,m)} h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \right. \right. \\ & + \frac{a_n^{mie}}{q_2} D_n^{(l,m)} \nabla \times h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \left. \right] - i a_{lm}^t \left[b_n^{mie} D_n^{(l,m)} h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \right. \\ & \left. \left. + \frac{a_n^{mie}}{q_2} C_n^{(l,m)} \nabla \times h_n^{(1)}(q_2 r) \bar{X}_{nm}(\theta, \varphi) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Hemos escrito los campos de esparcimiento debido a la esfera en función del campo que incide sobre ella.

2.4 La Difracción por el Sistema Esfera-Plano.

Al evaluar la condición de frontera (2.12) en el plano $z=-(a+D) = r\cos\theta$, se establece una relación entre la magnitud del vector posición r y el ángulo θ , esto trae como consecuencia que las diferentes funciones Bessel que aparecen en los campos ahora dependan del ángulo θ .

Además la condición de frontera (2.12) es una relación vectorial entre los campos involucrados, de esta podemos obtener dos ecuaciones; una ecuación establece que componente x del campo magnético es continua y la otra que su componente y también es continua.

Sustituyendo los campos dados por las ecuaciones (2.1), (2.7), (2.18) y (2.32) en la condición de frontera (2.12), tomando la componente en la dirección y de la ecuación vectorial obtenida, multiplicando por $P_l^{m'}(\cos\theta)\exp(-im'\varphi)$ e integrando con respecto a θ y φ obtenemos

$$\sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{Z_2}{\sqrt{l(l+1)}} \left\{ \begin{aligned} & a_{lm}^t \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} (a_n^{mie} C_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xh(q_2)} + b_n^{mie} D_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xh(q_2)}) + \sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} (C_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xj(q_2)} + D_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xj(q_2)}) \right] \\ & + i b_{lm}^t \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} (b_n^{mie} C_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xh(q_2)} + a_n^{mie} D_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xh(q_2)}) + \sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} (D_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xj(q_2)} + C_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xj(q_2)}) \right] \end{aligned} \right\} \quad (2.35)$$

$$- \sum_{l,m} Z_1 a_{lm}^r \xi_{l'm'lm}^{xh(q_1)} - i \sum_{l,m} Z_1 b_{lm}^r \eta_{l'm'lm}^{xh(q_1)}$$

$$- \sum_l Z_1 (\xi_{l'm'l1}^{xj(q_1)} - \xi_{l'm'l1}^{xj(q_1)}) a_{l1}^i - i \sum_l Z_1 (\eta_{l'm'l1}^{xj(q_1)} + \eta_{l'm'l-1}^{xj(q_1)}) b_{l1}^i = 0$$

Donde

$$\begin{aligned}
\xi_{l'm'lm}^{xh(q_v)} &= \frac{\pi}{\sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta h_l^{(1)}[-(a+D)q_v / \cos\theta] \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^{m+1}(\cos\theta) P_l^{m'}(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (l-m+1)(l+m) P_l^{m-1}(\cos\theta) P_l^{m'}(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} \right], \tag{2.36}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\xi_{l'm'lm}^{xj(q_v)} &= \frac{\pi}{\sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta j_l[-(a+D)q_v / \cos\theta] \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^{m+1}(\cos\theta) P_l^{m'}(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (l-m+1)(l+m) P_l^{m-1}(\cos\theta) P_l^{m'}(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} \right], \tag{2.37}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{l'm'lm}^{xh(q_v)} &= -\frac{i\pi \sqrt{l(l+1)}}{q_v(a+D)} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta P_l^{m'}(\cos\theta) \sin\theta \cos\theta h_l^{(1)}\left(-\frac{q_v(a+D)}{\cos\theta}\right) \\
&\quad \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} + \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right] \\
&\quad + \frac{i\pi}{q_v(a+D) \sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta [r h_l^{(1)}(q_v r)]'_{r=-\frac{(a+D)}{\cos\theta}} P_l^{m'}(\cos\theta) \\
&\quad \left\{ -\cos^2\theta \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{d}{d\theta} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} + \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{d}{d\theta} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right] \right. \\
&\quad \left. - \cot\theta \left[m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} - m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right] \right\} \tag{2.38}
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
\eta_{l'm'lm}^{xj(q_v)} = & -\frac{i\pi\sqrt{l(l+1)}}{q_v(a+D)}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\int_0^\pi d\theta P_l^{m'}(\cos\theta)\text{sen}\theta\cos\theta j_l\left(-\frac{q_v(a+D)}{\cos\theta}\right) \\
& \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)\delta_{m,m'+1} + \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)\delta_{m,m'-1}\right] \\
& + \frac{i\pi}{q_v(a+D)\sqrt{l(l+1)}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\int_0^\pi d\theta[rj_l(q_v r)]'_{r=-\frac{(a+D)}{\cos\theta}}P_l^{m'}(\cos\theta) \\
& \{-\cos^2\theta\left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\frac{dP_l^m(\cos\theta)}{d\theta}\delta_{m,m'+1} + \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\frac{dP_l^m(\cos\theta)}{d\theta}\delta_{m,m'-1}\right] \\
& -\cot\theta\left(m\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)\delta_{m,m'+1} - m\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)\delta_{m,m'-1}\right)\}
\end{aligned} \tag{2.39}$$

donde v puede valer 1 o 2; e indica el medio correspondiente ($v=1$ medio 1, $v=2$ medio 2). Por otra parte cuando el subíndice l sea n las ecuaciones anteriores se cambia l por n .

Sustituyendo los campos dados por las ecuaciones (2.2), (2.4), (2.17) y (2.34) condición de frontera (2.12), tomando la componente en la dirección y de la ecuación vectorial obtenida, multiplicando por $P_l^{m'}(\cos\theta)\exp(-im'\varphi)$ e integrando con respecto a θ y φ obtenemos

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=1}^l \sum_{m=-l}^l \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \left\{ \right. \\
& a_{lm}^t i \left[\sum_{n=1}^l \sqrt{n(n+1)} (a_n^{mie} C_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xh(q_2)} + b_n^{mie} D_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xh(q_2)}) + \sum_{n=|m|}^l \sqrt{n(n+1)} (D_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xj(q_2)} + C_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xj(q_2)}) \right] - \\
& b_{lm}^t \left[\sum_{n=1}^l \sqrt{n(n+1)} (b_n^{mie} C_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xh(q_2)} + a_n^{mie} D_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xh(q_2)}) + \sum_{n=|m|}^l \sqrt{n(n+1)} (C_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xj(q_2)} + D_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xj(q_2)}) \right] \left. \right\} \\
& - i \sum_{l,m} a_{lm}^r \eta_{l'm'lm}^{xh(q_1)} + \sum_{l,m} b_{lm}^r \xi_{l'm'lm}^{xh(q_1)} \\
& - i \sum_{l=1}^l a_{l1}^i (\eta_{l'm'l1}^{xj(q_1)} - \eta_{l'm'l-1}^{xj(q_1)}) + \sum_{l=1}^l b_{l1}^i (\xi_{l'm'l1}^{xj(q_1)} + \xi_{l'm'l-1}^{xj(q_1)}) = 0
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Sustituyendo los campos dados por las ecuaciones (2.1), (2.7), (2.18) y (2.32), tomando la componente en la dirección x de la ecuación vectorial obtenida, multiplicando por $P_l^{m'}$ $(\cos\theta)\exp(-im'\varphi)$ e integrando con respecto a θ y φ obtenemos

$$\sum_l \sum_{m=-l}^l \frac{Z_2}{\sqrt{l(l+1)}} \left\{ \begin{aligned} & a_{lm}^t \left[\sum_{n=1}^l \sqrt{n(n+1)} (a_n^{mie} C_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{yh(q_2)} + b_n^{mie} D_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{yh(q_2)}) + \sum_{n=|m|}^l \sqrt{n(n+1)} (C_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{yj(q_2)} + D_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{yj(q_2)}) \right] \\ & + i b_{lm}^t \left[\sum_{n=1}^l \sqrt{n(n+1)} (b_n^{mie} C_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{yh(q_2)} + a_n^{mie} D_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{yh(q_2)}) + \sum_{n=|m|}^l \sqrt{n(n+1)} (D_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{yj(q_2)} + C_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{yj(q_2)}) \right] \end{aligned} \right\} \quad (2.41)$$

$$- \sum_{l,m} Z_1 a_{lm}^r \xi_{l'm'lm}^{yh(q_1)} - i \sum_{l,m} Z_1 b_{lm}^r \eta_{l'm'lm}^{yh(q_1)}$$

$$- \sum_{l=1} Z_1 a_{lm}^i (\xi_{l'm'l1}^{yj(q_1)} - \xi_{l'm'l-1}^{yj(q_1)}) - i \sum_{l=1} Z_1 b_{l1}^i (\eta_{l'm'l1}^{yj(q_1)} + \eta_{l'm'l-1}^{yj(q_1)}) = 0$$

donde

$$\xi_{l'm'lm}^{yh(q_v)} = \frac{\pi}{i\sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta h_l^{(1)} [-(a+D)q_v / \cos\theta] \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^{m+1}(\cos\theta) P_l^{m'}(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right. \\ \left. - \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (l-m+1)(l+m) P_l^{m-1}(\cos\theta) P_l^{m'}(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} \right], \quad (2.42)$$

$$\xi_{l'm'lm}^{yj(q_v)} = \frac{\pi}{i\sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta j_l [-(a+D)q_v / \cos\theta] \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^{m+1}(\cos\theta) P_l^{m'}(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right. \\ \left. - \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (l-m+1)(l+m) P_l^{m-1}(\cos\theta) P_l^{m'}(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} \right], \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned}
\eta_{l'm'lm}^{yh(q_v)} &= \frac{\pi\sqrt{l(l+1)}}{q_v(a+D)} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta P_l^{m'}(\cos\theta) \sin\theta \cos\theta h_l^{(1)}\left(-\frac{q_v(a+D)}{\cos\theta}\right) \\
&\left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} - \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right] \\
&- \frac{i\pi}{q_v(a+D)\sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta [rh_l^{(1)}(q_v r)]'_{r=-\frac{(a+D)}{\cos\theta}} P_l^{m'}(\cos\theta) \\
&\{\cos^2\theta \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{dP_l^m(\cos\theta)}{d\theta} \delta_{m,m'+1} - \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{dP_l^m(\cos\theta)}{d\theta} \delta_{m,m'-1} \right] \\
&+ \cot\theta \left(m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} + m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right)\},
\end{aligned} \tag{2.44}$$

y

$$\begin{aligned}
\eta_{l'm'lm}^{yj(q_v)} &= \frac{\pi\sqrt{l(l+1)}}{q_v(a+D)} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta P_l^{m'}(\cos\theta) \sin\theta \cos\theta j_l\left(-\frac{q_v(a+D)}{\cos\theta}\right) \\
&\left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} - \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} \right] \\
&- \frac{i\pi}{q_v(a+D)\sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_0^\pi d\theta [rj_l(q_v r)]'_{r=-\frac{(a+D)}{\cos\theta}} P_l^{m'}(\cos\theta) \\
&\{\cos^2\theta \left[\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{dP_l^m(\cos\theta)}{d\theta} \delta_{m,m'+1} - \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{dP_l^m(\cos\theta)}{d\theta} \delta_{m,m'-1} \right] \\
&+ \cot\theta \left(m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'+1} + m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \delta_{m,m'-1} \right)\}
\end{aligned} \tag{2.45}$$

Cuando el subíndice l sea n las ecuaciones anteriores se cambia l por n .

Sustituyendo los campos dados por las ecuaciones (2.2), (2.4), (2.17) y (2.34), tomando la componente en la dirección x de la ecuación vectorial obtenida, multiplicando por $P_l^{m'}(\cos\theta)\exp(-im'\varphi)$ e integrando con respecto a θ y φ obtenemos

$$\begin{aligned}
& \sum_l \sum_{m=-l}^l \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \left\{ \right. \\
& i a_{lm}^t \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} (a_n^{mie} C_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{yh(q_2)} + b_n^{mie} D_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{yh(q_2)}) + \sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} (D_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xj(q_2)} + C_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xj(q_2)}) \right] \\
& - b_{lm}^t \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} (b_n^{mie} C_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{yh(q_2)} + a_n^{mie} D_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{yh(q_2)}) + \sum_{n=|m|}^{\infty} \sqrt{n(n+1)} (C_n^{(l,m)} \xi_{l'm'nm}^{xj(q_2)} + D_n^{(l,m)} \eta_{l'm'nm}^{xj(q_2)}) \right] \left. \right\} \quad (2.46) \\
& - i \sum_{l,m} a_{lm}^r \eta_{l'm'lm}^{yh(q_1)} + \sum_{l,m} b_{lm}^r \xi_{l'm'lm}^{yh(q_1)} \\
& - i \sum_{l=1}^{\infty} a_{l1}^i (\eta_{l'm'l1}^{yj(q_1)} - \eta_{l'm'l-1}^{yj(q_1)}) + \sum_{l=1}^{\infty} b_{l1}^i (\xi_{l'm'l1}^{yj(q_1)} + \xi_{l'm'l-1}^{yj(q_1)}) = 0
\end{aligned}$$

Las ecuaciones (2.35), (2.40), (2.41) y (2.46) representan un sistema de ecuaciones de dimensión infinita cuyas incógnitas son los coeficientes a y b de los campos esparcidos en el medio 1 y el medio 2. Si la serie se cortará hasta un máximo L , entonces se tiene una matriz de dimensión $4L(L+2) \times 4L(L+2)$.

En este capítulo se obtuvo un sistema de cuatro ecuaciones acopladas, la solución de este sistema permitirá conocer los coeficientes $a_{l,m}^r$, $b_{l,m}^r$, $a_{l,m}^t$ y $b_{l,m}^t$ de los campos esparcidos en el medio 1 y el medio 2. Una vez que estos son encontrados, se pueden calcular los coeficientes para el campo dentro de la esfera y el campo esparcido fuera de ella, con lo cual hemos resuelto formalmente el problema de la difracción por el sistema esfera-plano.

Capítulo 3

Resultados Numéricos

En este capítulo presentamos resultados numéricos de la difracción de ondas electromagnéticas por esferas dieléctricas débilmente absorbentes y no dispersivas (sección 3.1), metálicas con función dieléctrica tipo Drude (sección 3.2) y por un plano-esfera (sección 3.3). Los radios fueron variados desde 10 nm hasta 5000 nm.

Básicamente se hicieron dos programas escritos en lenguaje FORTRAN, uno para calcular todas las cantidades física que se requirieron para el caso de la esfera sola y otro para el caso del plano-esfera.

En todas las secciones se mostraran todas o algunas de las siguientes cantidades físicas: el campo lejano, el campo cercano, la sección eficaz de extinción, de esparcimiento, así como la variación de la intensidad con respecto a la distancia del origen de la esfera.

Cabe aclarar que el libro de Bohren y Huffman [40] tiene un apéndice con un código en FORTRAN para el caso de una esfera con el que se puede calcular la sección eficaz de extinción, de esparcimiento, así como la intensidad en la aproximación de campo lejano, pero no se puede calcular el campo cercano.

3.1 Modos Susurrantes de Galería en Esferas Dieléctricas.

En esta sección se estudiará el esparcimiento de ondas electromagnéticas por esferas dieléctricas no dispersivas y algunas veces débilmente absorbentes. También se analizará la condición para la excitación del llamado modo susurrante de galería (WGM por sus siglas en Inglés Whispering Gallery Mode).

Convergencia de la expansión multipolar

En el capítulo 1 se mostró que el campo eléctrico (magnético) se puede expresar en forma multipolar, donde el índice l puede tomar los valores de 1, 2, hasta infinito, mientras que m varia de $-l$ hasta $+l$. Desde el punto de vista del cálculo, la expansión multipolar es cortada hasta un cierto valor L . Así que la pregunta lógica es ¿cuántos términos necesitamos para que la diferencia entre las mismas cantidades físicas calculadas con L y $L+1$ no sea más grande que 1%? Cuando se ha alcanzado este criterio se dice que la solución converge para el valor L . La respuesta a esta pregunta no tiene una respuesta universal, si no que depende fuertemente del radio de la esfera y de la longitud de onda, pero también depende del índice de refracción de la esfera y del medio que la rodea. En el caso de plano esfera, la convergencia depende además de otras cantidades, como la separación plano-esfera, por dar un ejemplo. Una regla gruesa es radios grandes implican L grandes.

Para ejemplificar lo expuesto sobre la convergencia, estudiaremos la difracción de luz, longitud de onda de 633 nm, por una esfera con un índice de refracción de 1.5, radio 10 nm y rodeada por aire cuyo índice de refracción se puede aproximar a 1.0.

En la figura 3.1 se muestra el campo cercano (el módulo cuadrado de campo eléctrico cerca de la esfera) para cuatro distintos valores de L . a) $L=2$, b) $L=4$, c) $L=6$, d) $L=20$.

La convergencia se alcanza cuando $L=4$, hay otras cantidades físicas donde converge más rápido, por ejemplo la sección eficaz de extinción con $L=1$ es suficiente para que la curva converja.

De las imágenes se puede observar una aparente discontinuidad entre el campo eléctrico dentro y fuera de la esfera, pero esto se explica por la sencilla razón de que el módulo cuadrado del campo no es continuo, las cantidades que son continuas son la componente normal de desplazamiento y las componentes tangenciales del campo eléctrico.

Una de las características importante, por su reciente aplicación, de la difracción de luz por esferas dieléctricas de tamaños micrométricos, cuando no existe acoplamiento de modos, es que las esferas actúan como lentes gruesas y pueden enfocar la luz en regiones tridimensionales del orden sub-longitud de onda [11].

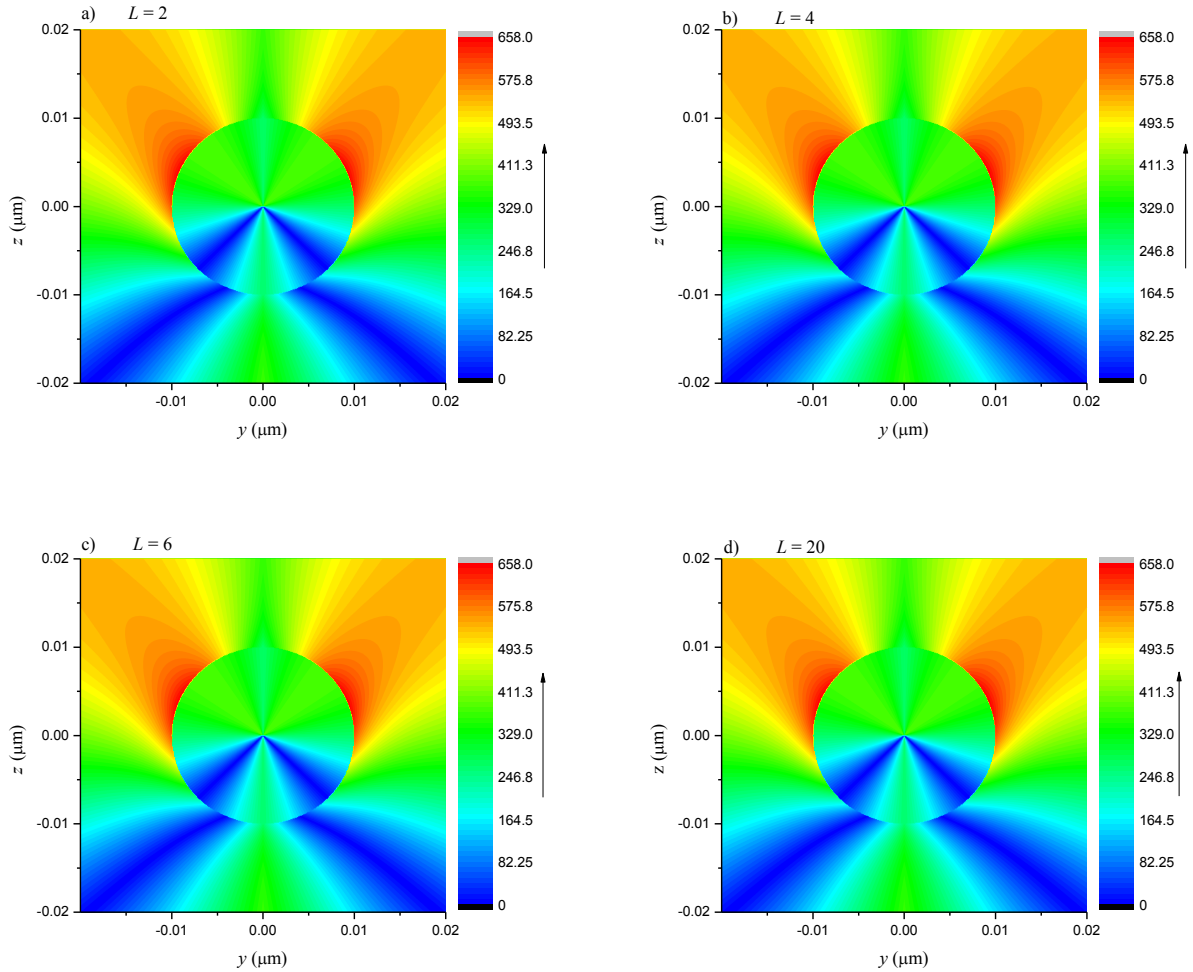


Figura 3.1 El campo cercano proyectado en el plano z - y para una esfera de 10 nm de radio y de índice de refracción 1.5 en aire $n = 1$ a $\lambda = 633$ nm; para diferentes valores de L : a) $L=2$, b) $L=4$, c) $L=6$ d) $L=20$. La flecha indica la dirección de la onda incidente.

Gracias a este fenómeno se ha tenido un gran avance en formar imágenes a escala de nanómetros (nanolitografía) y en espectroscopia Raman para someter a moléculas a intensos campos electromagnéticos [30]. A este efecto se le llama nanojet (nanoscale photonic jet). En esta parte estudiaremos los nanojet como función del radio de la esfera.

En las figura 3.2 se muestra el campo cercano proyectado sobre plano z - y para una esfera de 1 μm y 5 μm de radio en a) y b) respectivamente; con índice de refracción $n_2=1.5$ rodeada de aire $n_1=$

1 a $\lambda = 633 \text{ nm}$. Se observa que la esfera confina parte de la luz incidente en una región del espacio muy pequeña y muy cerca de su superficie, es decir, se comporta como una lente gruesa.

El máximo de intensidad se encuentra en el eje z , esto se debe a que la onda incidente tiene dirección de propagación z . A medida que aumenta el radio de la esfera la región de máxima intensidad se extiende a lo largo del eje z de 0.78λ en (a) y 1.5λ en (b), a su vez el ancho de la región (eje y) se hace más angosta (de 1.73λ a 0.78λ), aproximadamente.

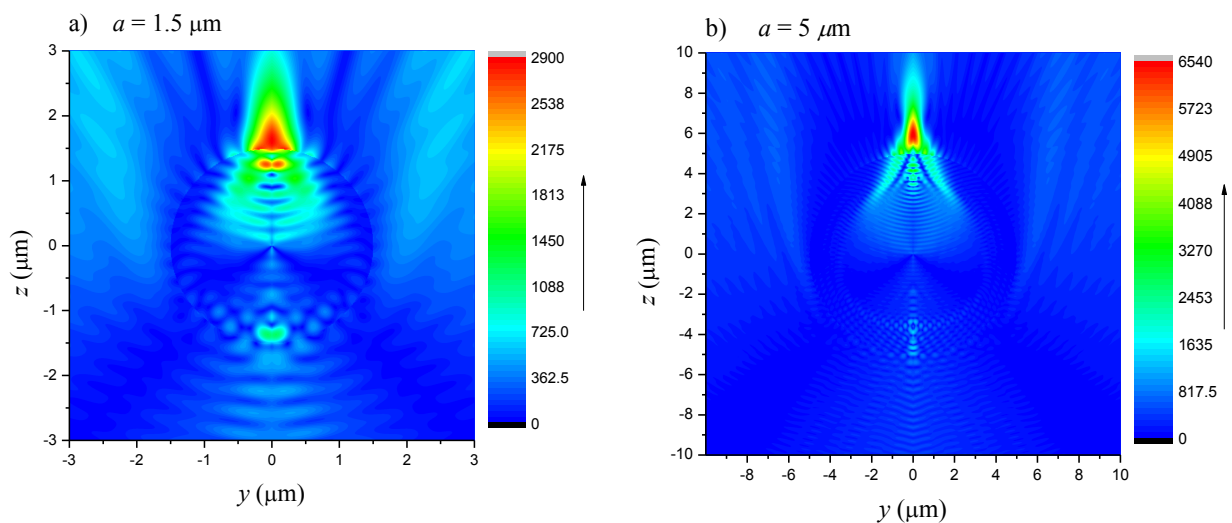


Figura 3.2 Campo cercano proyectado en el plano z - y para una esfera de $1 \mu\text{m}$ y $5 \mu\text{m}$ de radio en a) y b) respectivamente; con un índice de refracción $n_2 = 1.5$ rodeada de aire $n_1 = 1$. La convergencia se alcanza en a) con $L=51$ y en b) con $L = 131$. La flecha indica la dirección de la onda incidente, $\lambda = 633\text{nm}$.

En el interior de la esfera, se puede apreciar como esta actúa como un lente convergente en hemisferio inferior y luego como una lente divergente en su parte superior.

En el exterior, se puede apreciar la interferencia entre la onda incidente y la esparcida por la esfera en dirección contraria a la incidente. De las gráficas se midieron las distancias entre dos máximos consecutivos y la diferencia entre ellas es del orden de $\lambda/2$, pero no es exacto como se debería de esperar, quizás sea debido a la cercanía de la esfera.

En la figura 3.3 se muestra la variación del foco f , el máximo de intensidad medida desde la superficie de la esfera, como función del radio de la esfera, para $\lambda = 633 \text{ nm}$. A grosso modo es posible decir que a medida que aumenta el radio a el foco se aleja de la misma, sin embargo, existen máximos y mínimos a medida que aumenta la esfera. Para realizar ésta gráfica se calcula el campo cercano de varias esferas con distinto radio, como en la fig. 3.2, después con el programa Origin se busca el foco.

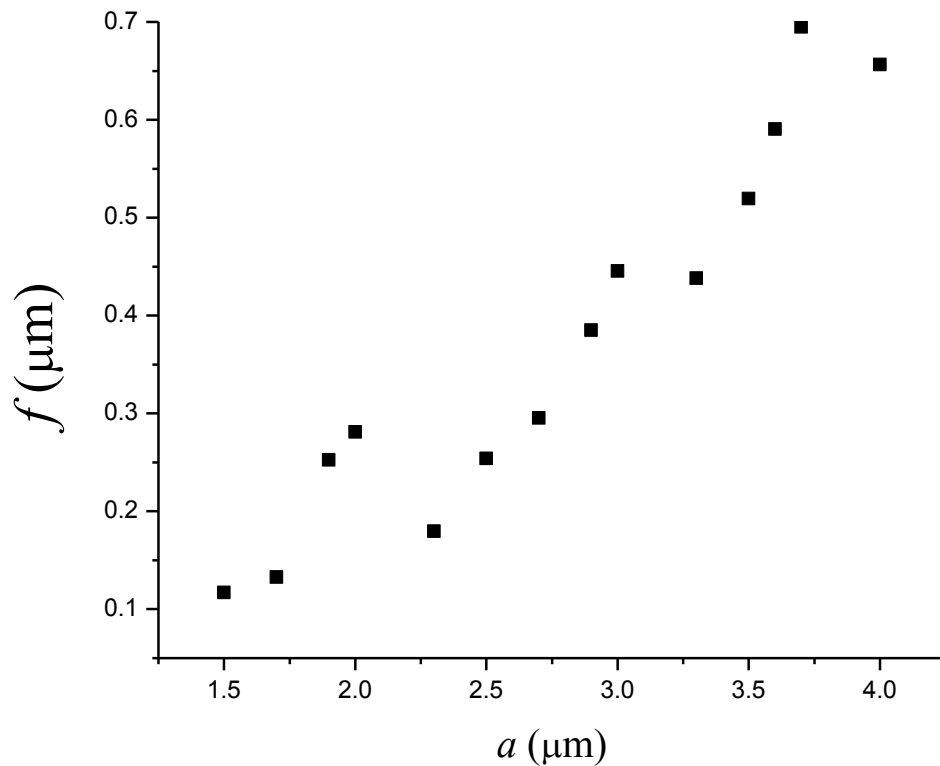


Figura 3.3 El foco versus el radio de la esfera, para $n_2=1.5$ y $n_1=1$. Los radios de variaron de 1.5 a 4.0 μm con $\lambda = 633 \text{ nm}$.

Otra característica muy importante es que las esferas dieléctricas pueden soportar modos electromagnéticos de superficie, llamados modos de galería susurrantes (WGM), es decir en este caso la luz queda atrapada cerca de la superficie interior de la esfera, debido al campo cercano producido por la reflexión total interna, provocando que la intensidad del campo electromagnético en la vecindad de la superficie aumente. [14]

Los WGM que se acoplan a una onda electromagnética incidente se pueden identificar mediante los máximos que aparecen en la sección eficaz de extinción. Estos modos pueden ser tipo TE o TM, y a éstos se les puede asociar una onda parcial (coeficientes en el desarrollo multipolar). Los modos tipo TE están asociados con las ondas parciales a_l , a su vez los modos tipo TM están relacionados con las ondas parciales b_l .

En la figura 3.4 se muestra la sección eficaz de extinción (SEE) versus la longitud de onda para una esfera dieléctrica de 5 μm de radio, un índice de refracción de 1.5 suspendida en el aire $n=1$. Para poder asociar los máximos de la SEE a las ondas parciales se buscan los mínimos del denominador de los coeficientes variando la longitud de onda entre los límites deseados.

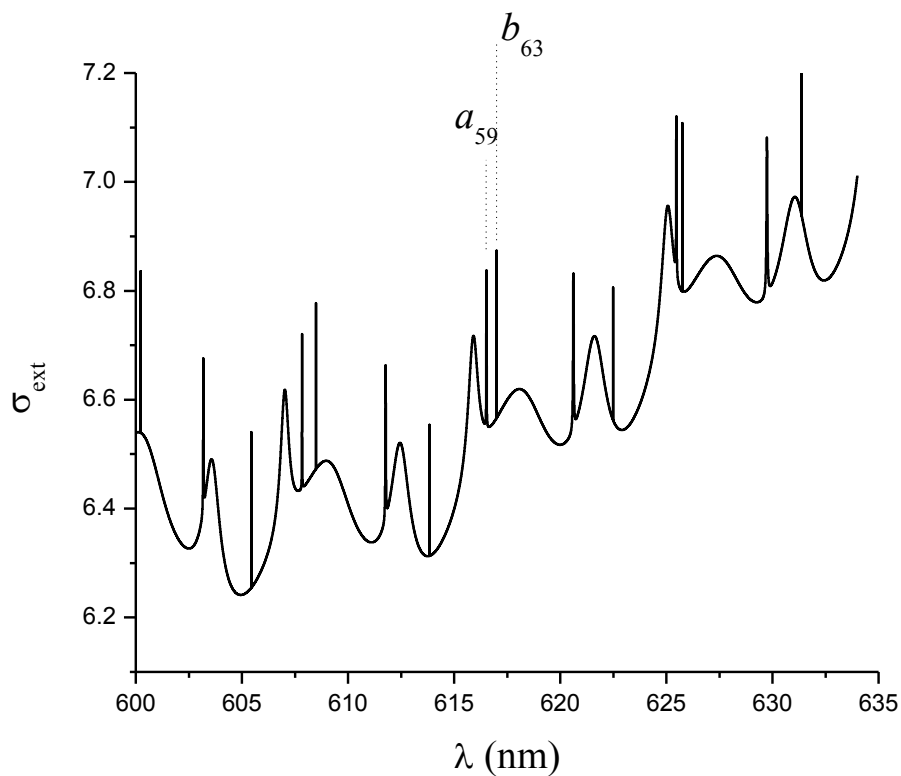


Figura 3.4. La sección eficaz de extinción con respecto a la longitud de onda, de una esfera 5 μm de radio con índice de refracción $n_e=1.5$ en el aire $n_1=1$. La longitud de onda λ se varió desde 600 nm a 635 nm. Las letras encima de los picos identifican a las ondas parciales asociadas.

Cuando no hay acoplamiento de modos el campo cercano se comporta como los mostrados en las figuras 3.1, ¿Cómo será el comportamiento del campo cercano cuando existe acoplamiento entre la luz y un WGM?

En las figuras 3.5 se muestra el campo cercano proyectado en el plano z - y para una esfera de radio $5\ \mu\text{m}$ con índice de refracción de 1.5 en aire $n=1$ para a) $\lambda=617.00329$ y b) $\lambda=616.55229$. Para la primera longitud de onda el modo resonante es TM y corresponde al orden $(63,1)$, mientras que para la segunda λ el modo resonante es TE y corresponde al orden $(59,1)$

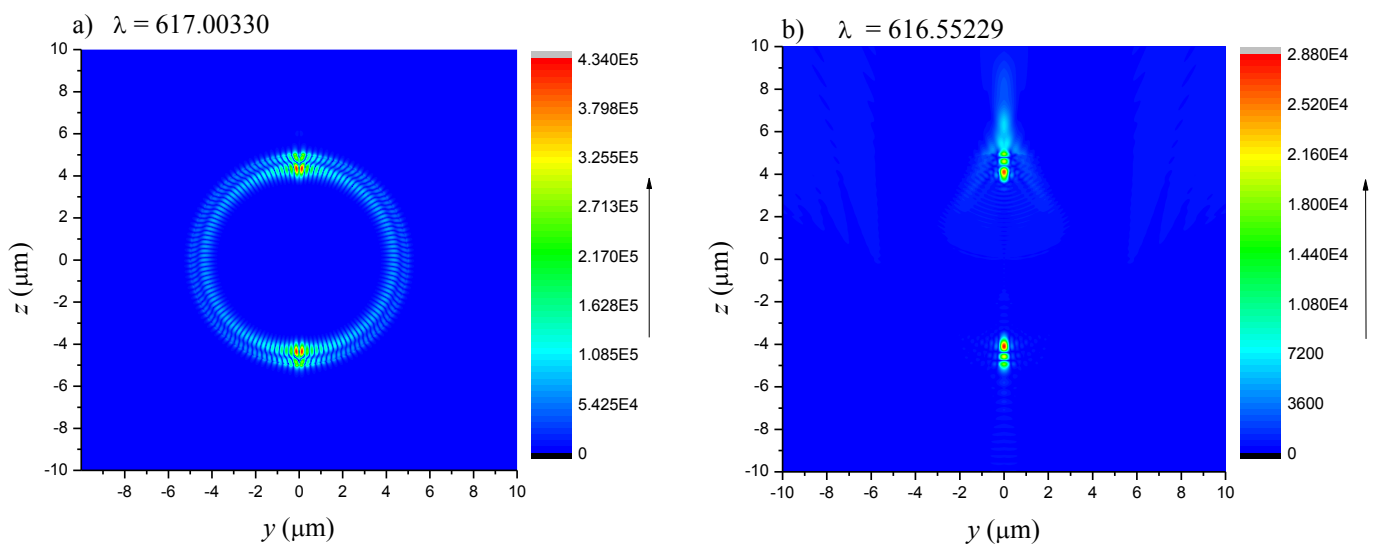


Figura 3.5 El campo cercano proyectado en el plano y - z para una esfera de $5\ \mu\text{m}$ de radio con un índice de refracción de 1.5 , suspendida en el aire $n = 1$. a) $\lambda = 617.00330\ \text{nm}$ y la onda parcial asociada a la resonancia es b_{63} ; b) $\lambda = 616.55229\ \text{nm}$ y la onda parcial es a_{59} . La convergencia se alcanza para $L = 150$.

En la figura 3.5 a) se observa que hay cuatro máximos simétricos con respecto al eje z y en b) hay 2 a lo largo del eje z , esto es debido a que la onda incidente tiene incidencia en dirección z . De la figura se observan máximos y mínimos de intensidad cerca de la superficie interior de la esfera, lo cual se puede explicar cualitativamente de la siguiente manera, existen dos ondas superficiales en el interior de la esfera una viajando en sentido de las manecillas del reloj y la otra en sentido opuesto, esta interfieren provocando el patrón de interferencia descrito.

Pasaremos a estudiar la luz esparcida a tres longitudes de onda distintas, dos en resonancia $\lambda = 617.00330$ nm y $\lambda = 616.55229$ nm; y una longitud de onda sin resonancia en el sistema.

En la figura 3.6 se muestra $|E_{\varphi}^s|$ con respecto el ángulo θ en escala logarítmica para el caso de una esfera de radio 5 μm . En a) se muestra el caso resonante b_{63} (línea roja) y el caso no resonante (línea negra) a $\lambda = 633$ nm; en b) se estudia el caso resonante asociado a a_{59} (línea roja) y para el caso no resonante (línea negra). Sin embargo no es posible con base a este estudio observar diferencias sustanciales para identificar la resonancia mediante medidas de esparcimiento de luz.

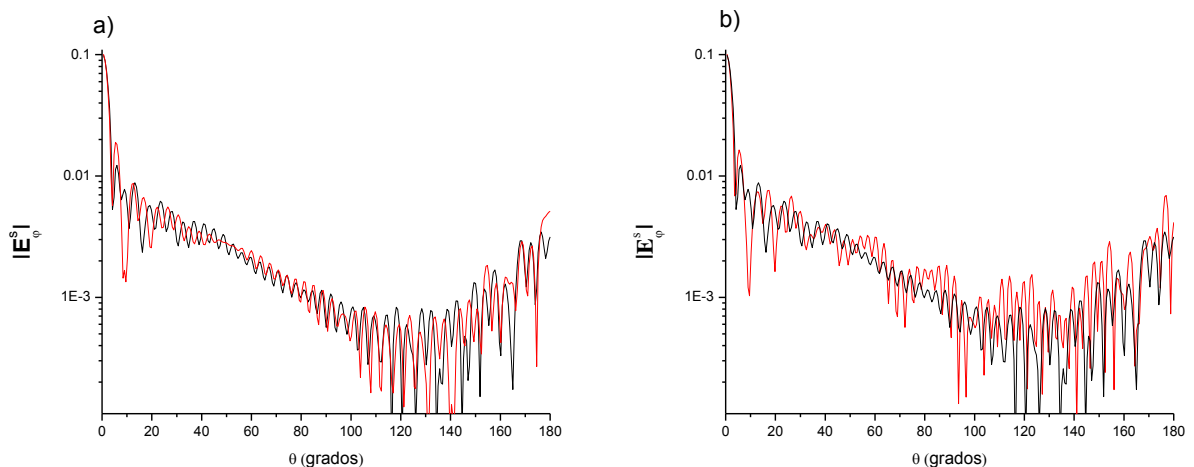


Figura 3.6 Se muestra $|\vec{E}_{\varphi}^s|$ con respecto el ángulo θ en escala logarítmica para una esfera de radio de 5 μm , con un índice de refracción de 1.5 en el aire $n = 1$. a) se muestra el caso resonante a_{59} (línea roja) y el caso no resonante (línea negra) a $\lambda = 633$ nm. b) se muestra el caso resonante b_{63} (línea roja) y el caso no resonante (línea negra) a $\lambda = 633$ nm.

En esta sección estudiamos los nanojet como función del radio de la esfera y se discutió la excitación de los WGM en este tipo de sistemas.

3.2 Plasmones de Superficie en Esferas Metálicas

En esta sección estudiaremos la difracción por esferas metálicas. El metal se asume que tiene un comportamiento tipo Drude dado por la ec. (1.96). Para poder comparar con algunos resultados mostrados en la referencia [13] presentamos la constante dieléctrica, ec. (2) de la misma referencia, que ellos usaron en su artículo,

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega_p\omega} \right).$$

Los parámetros empleados son $\varepsilon_{\infty} = 1$, $2\pi\hbar\omega_p = 10.00$ eV, donde h es la constante de Planck.

Las frecuencias de los modos soportados por esferas metálicas con respuesta tipo Drude en el caso no-retardado están dadas por una sencilla expresión, ver Ruppín en ref. [5],

$$\omega_l = \omega_p \sqrt{\frac{l}{2l+1}}, \quad l = 1, 2, \dots$$

Esta frecuencias son aplicables en el caso de radios mucho menores que la longitud de onda.

En el caso retardado las frecuencias complejas de los modos, lo cual refleja el hecho de que los plasmones de superficie tienen una vida media finita debido a su decaimiento radiativo, se calculan haciendo cero el denominador de la ec. 1.81. Estas frecuencias fueron calculadas en la referencia [5].

En la figura 3.7 se muestra la intensidad del campo cercano, el módulo cuadrado del campo eléctrico, calculado en el plano z - y para a) $L=1$, b) $L=3$, c) $L=5$ y d) $L=20$. La esfera metálica tiene un radio de 10 nm. La onda electromagnética incidente está linealmente polarizada y se propaga en la dirección z . La longitud de onda es de 633 nm, la cual corresponde a una frecuencia de $2\pi\hbar\omega = 1.96$ eV. Para esta longitud de onda, la constante dieléctrica de la esfera tiene el siguiente valor $\varepsilon(\omega) = -25.0 + i1.33$.

De las figuras se puede apreciar que la convergencia se alcanzó para $L=5$, esto se verificó numéricamente de acuerdo al criterio establecido en la sección 3.

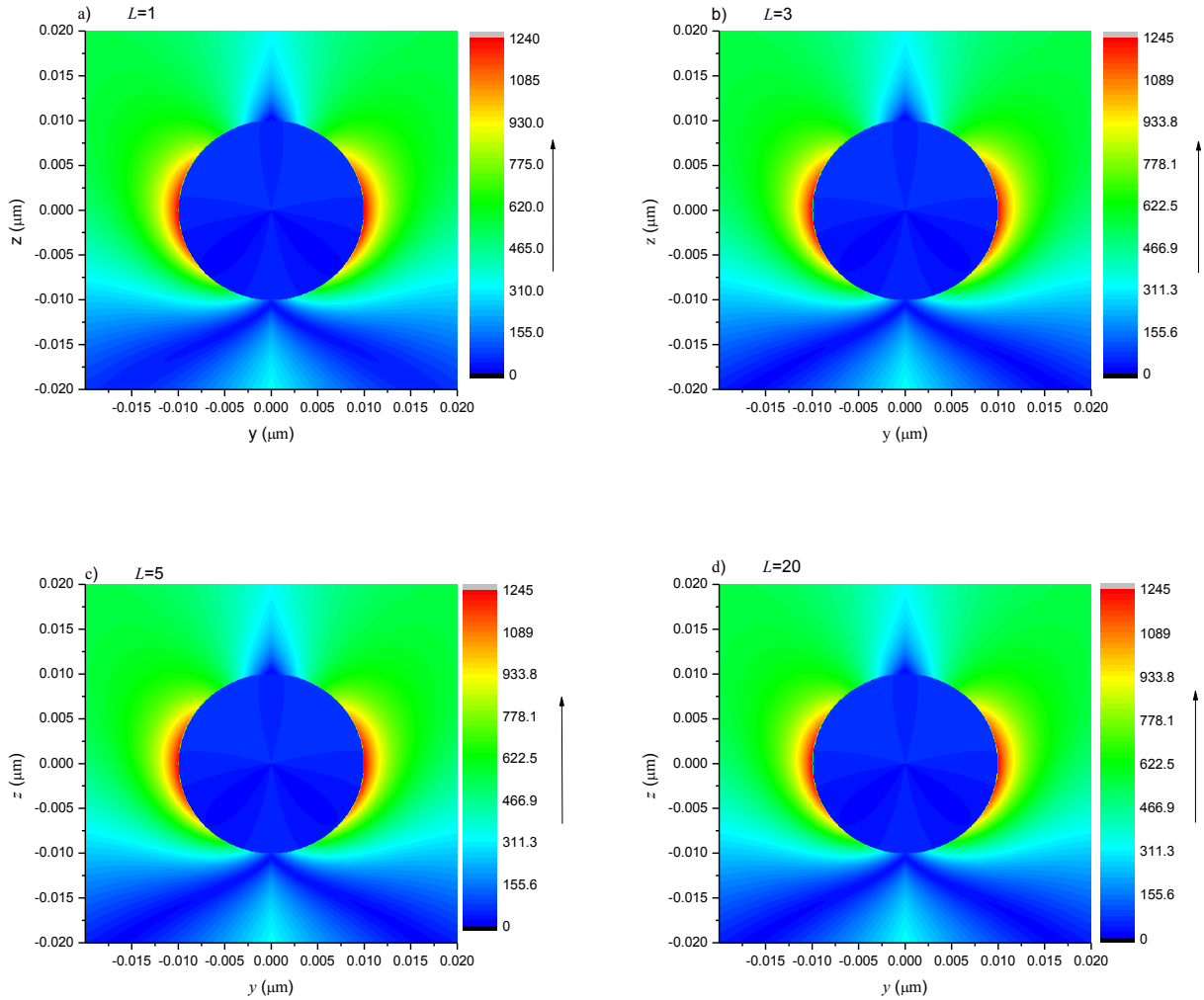


Figura 3.7 La intensidad de campo cercano proyectado en el plano z - y debido a una esfera metálica de radio 10 nm, para diferentes valores de L : a) $L=1$, b) $L=3$, c) $L=5$ y d) $L=20$. La flecha indica la dirección de la onda incidente, $\lambda = 633$ nm, y $\gamma = 0.01$.

En las imágenes se puede observar que la esfera presenta un comportamiento tipo dipolar con orientación en el eje- y , que coincide con la dirección de oscilación del campo eléctrico incidente. Este es un comportamiento típico de la difracción de luz por nano-esferas metálicas. También se observa que los dos máximos de intensidad del campo se localizan muy cerca de la superficie, típicamente del orden de $a/10$.

En la figura 3.8 se muestra la sección eficaz de extinción (SEE) como función de la frecuencia dividida entre la frecuencia de plasma para una esfera metálica de 10 nm de radio. La curva de color rojo corresponde a $\gamma = 0$ y la de color negro a $\gamma = 0.01$. La SEE muestra un comportamiento tipo Lorentziano con un máximo localizado a una frecuencia de $0.56 \omega_p$ que corresponde a la excitación del plasmon de superficie y se le asocia la onda parcial b_{11} (modo tipo TM). Este valor se acerca a $\omega_p/\sqrt{3} = 0.58\omega_p$ que corresponde al primer modo en la aproximación no-retardada, esto se debe a que la esfera tiene un radio muy pequeño comparado con la longitud de onda.

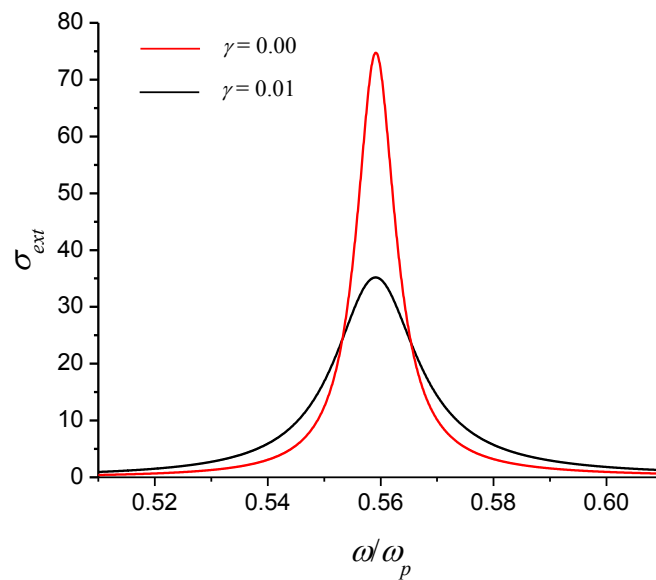


Figura 3.8. La sección eficaz de extinción como función de la frecuencia adimensional ω/ω_p , para una esfera metálica de radio $a = 10$ nm, a) la curva de color rojo corresponde a $\gamma = 0$ y b) y la negra a $\gamma = 0.01$. El valor $\omega_p/\sqrt{3}$ que corresponde a frecuencia del primer modo en la aproximación no-retardada.

La SEE cuando $\gamma = 0$ tiene un valor máximo más grande que cuando $\gamma = 0.01$, pero una anchura menor, esto se debe a la absorción del medio. La anchura para $\gamma = 0$ y $\gamma = 0.01$ son 0.00782 y 0.01900 en unidades de ω/ω_p , respectivamente.

Una consecuencia de la excitación de un plasmón de superficie es el incremento del campo eléctrico muy cerca de la superficie. Para observar este efecto la esfera metálica se estudia en la frecuencia de resonancia.

En la figura 3.9 se muestra la intensidad del campo cercano proyectado sobre el plano z - y para $L=5$, $a=10$ nm, $\gamma=0.01$ y a la frecuencia de resonancia $\omega=0.56\omega_p$. Se puede observar de nuevo el comportamiento dipolar anteriormente descrito. Los máximos de intensidad del campo eléctrico están muy cerca de la superficie, pero son aproximadamente 20 veces mayores que los máximos mostrados en la figura 3.9, además la intensidad es notable a distancias del orden del radio, al menos a lo largo del eje- y .

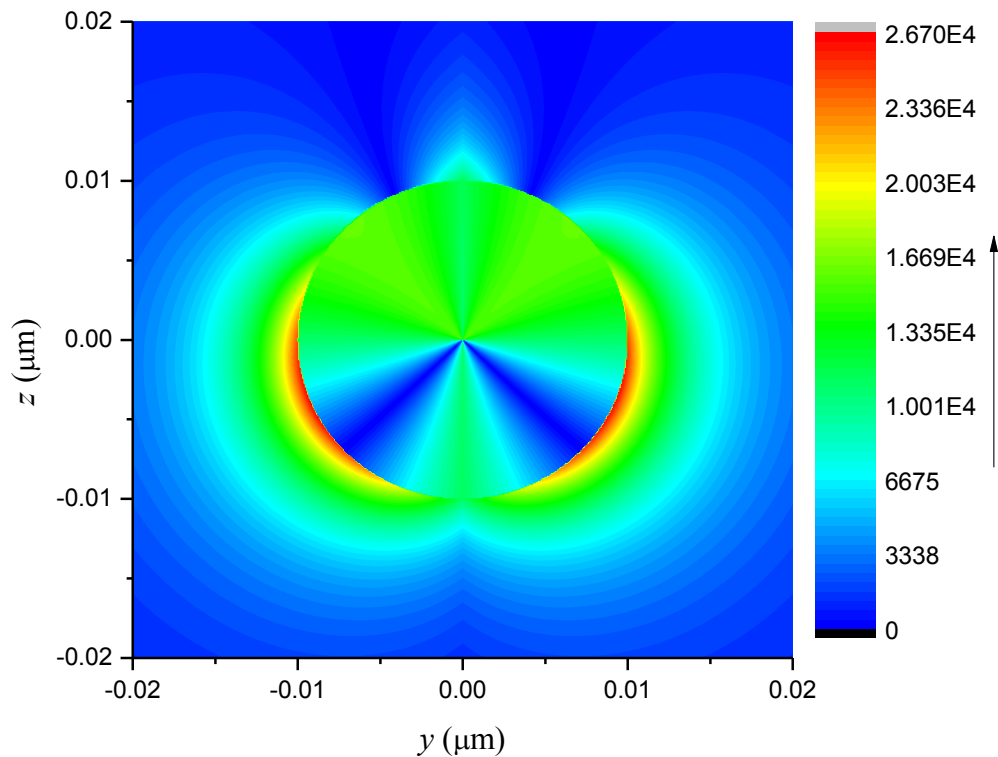


Figura 3.9. La intensidad del campo cercano calculado en el plano z - y para $L=5$, $a=10$ nm, $\gamma=0.01$ y a la frecuencia de resonancia $\omega=0.56\omega_p$, la cual corresponde a una longitud de onda $\lambda=221.774$ nm. La flecha indica la dirección de la onda incidente.

En la figura 3.10 se muestra el modulo de la componente φ del campo eléctrico como función del ángulo de esparcimiento, para $a = 10$ nm y $\gamma = 0.01$, la curva de color rojo corresponde al caso resonante y la negra al caso no resonante.

Observamos que la magnitud del campo cuando hay resonancia es mayor que cuando no la hay, la distribución angular es la misma. Sólo hay un mínimo alrededor de 90° .

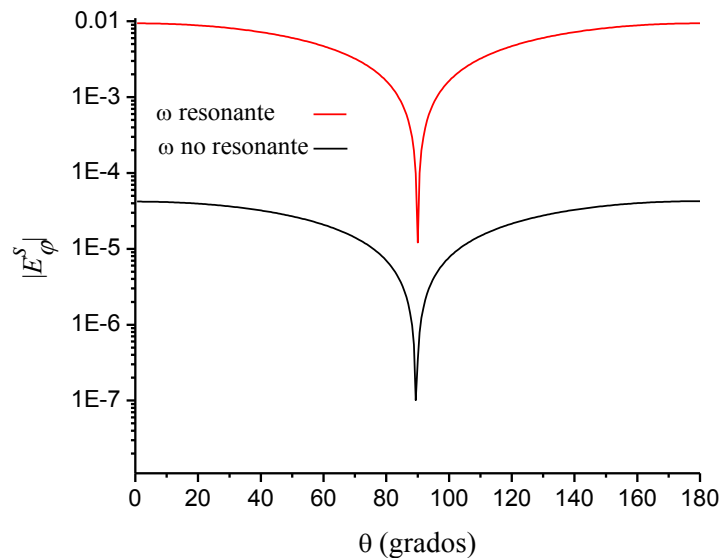


Figura 3.10. El modulo de la componente φ del campo eléctrico esparcido $|E_\varphi^s|$ como función del ángulo de esparcimiento, para una esfera de radio $a = 10$ nm. La curva de color rojo corresponde al caso resonante y la negra al caso no resonante.

La intensidad muestra un comportamiento cuasi-lambertiano con ninguna otra característica digna de rescatar.

La fórmula de la frecuencia de los plasmones de superficie en esferas, en el caso no-retardado proporciona un número discreto e infinito de ellas. Sin embargo, en el caso anteriormente estudiado se observó solo una resonancia, pero no se manifestó ninguna otra.

En el caso retardado, varios autores como Ruppin [5], Martinos [8], Ancy *et al.* [13] reportaron varias resonancias, así que para observarlas escogemos un radio mayor con el objetivo de reproducir una de las curvas mostrada en [13].

En la figura 3.11 se muestra la sección eficaz de esparcimiento SES como función $\omega a/c$ para una esfera con un radio $a = 2\pi c/\omega_p$, $L=10$. La curva de color negro fue calculado con $\gamma = 0$, mientras que la curva roja con $\gamma=0.01$. Los datos mostrados en la fig. 3.11 están en excelente acuerdo con el resultado de la figura 1 de la ref. [13] y que fueron publicados en 2009. Se observan ocho máximos asociados con resonancia y a seis de ellos se les pueden asociar las ondas parciales b_{31} , b_{41} , b_{51} , b_{61} , b_{71} , y b_{81} . Para el caso $\gamma = 0.01$, la SES disminuye en intensidad y dos de las resonancias desaparecen por completo.

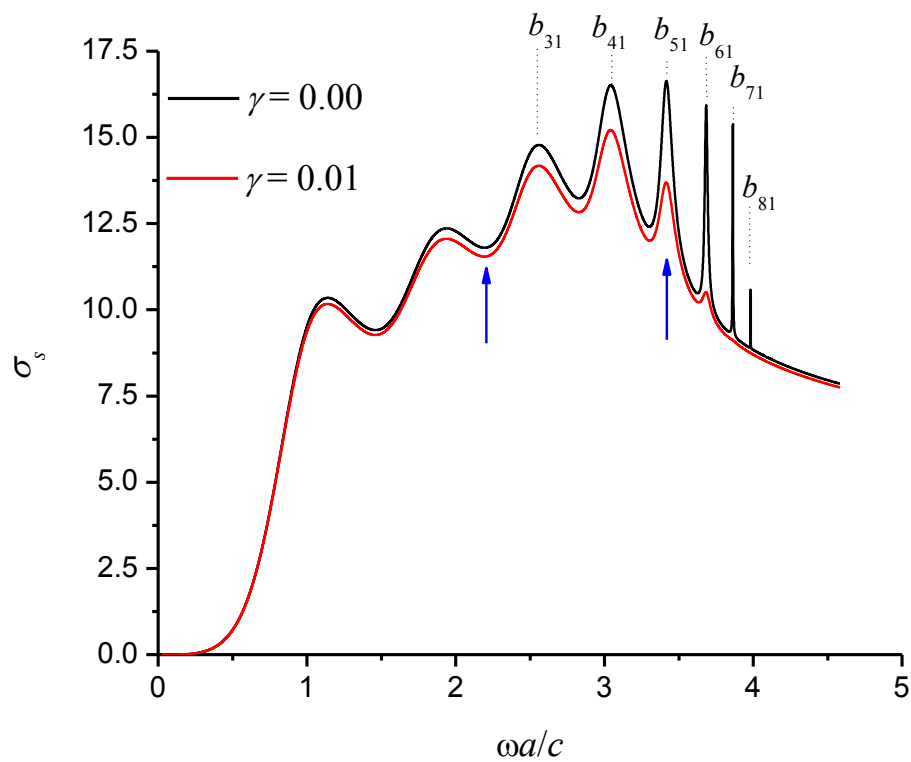


Figura 3.11 Sección eficaz de esparcimiento como función de la frecuencia $\omega a/c$. El radio de la esfera es $a = 2\pi c/\omega_p$. La curva solida de color negro se calculó con $\gamma = 0.00$ y la curva en color rojo con $\gamma = 0.01$

En la figura 3.11 se incluye el símbolo del coeficiente de la onda parcial relacionado con cada resonancia. Para lograr asociar a cada resonancia una onda parcial se encontró el mínimo del denominador asociado de cada una de ellas. Los modos excitados son del tipo TM solamente.

Ahora pasaremos a estudiar la luz esparcida y el campo cercano producidas por la esfera metálica a dos frecuencia distintas, una resonante $\omega a/c= 3.41$ y la otra no resonante $\omega a/c=2.18$, ambas marcadas con flechas de color azul en la figura anterior.

En la figura 3.12 se muestra $|E_{\varphi}^s|$ como función del ángulo de esparcimiento para un esfera de radio $a = 2\pi c/\omega_p$, $L = 10$, a) $\gamma = 0.0$ y b) $\gamma = 0.01$. La curva en color rojo es para el caso de resonancia 228 nm ($\omega a/c = 3.41$) y la curva en color negro es para el caso no resonante 356 nm ($\omega a/c = 2.18$). De nuevo es posible apreciar que el campo eléctrico en resonancia es mayor que fuera de ella al menos para ángulos pequeños. Mientras que, los campos son aproximadamente iguales para ángulos grandes

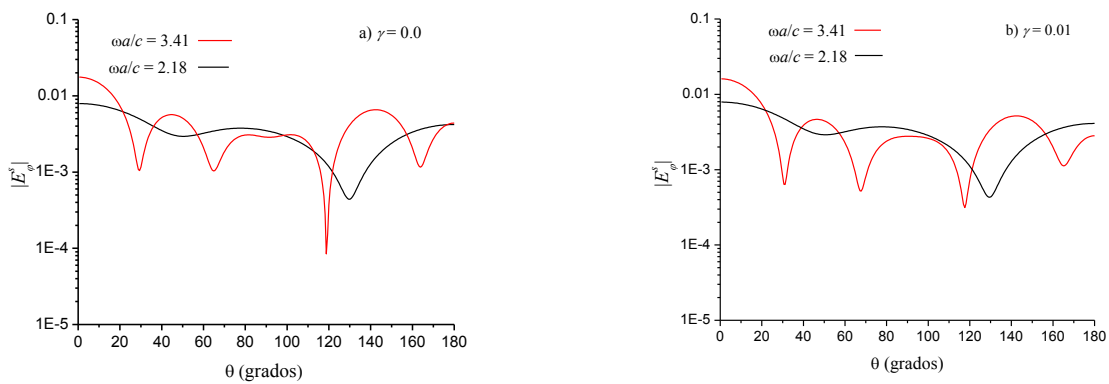


Figura 3.12. El módulo de $|E_{\varphi}^s|$ como función del ángulo de esparcimiento para a) $\gamma = 0.0$ y b) $\gamma = 0.01$. El color rojo es para el caso de resonancia 228 nm ($\omega a/c= 3.41$) color negro para el caso de no-resonancia 356 nm ($\omega a/c= 2.18$).

La intensidad del campo lejano presenta máximos y mínimos relacionado con el radio de la esfera. A mayor tamaño mayor número de máximos. De estas curvas no es posible determinar si la luz ha excitado a uno de los modos del sistema

En la figura 3.13 se muestra el campo cercano proyectado en el plano z - y para $L=10$, radio $a = 2\pi c/\omega_p$, y a la frecuencia de resonancia $\omega a/c=3.41$, para a) casos $\gamma=0$ y b) caso $\gamma=0.01$.

El plasmon de superficie excitado despliega diez lóbulos que rodean a la esfera. El número de estos corresponde adecuadamente al orden multipolar (5,1) asociado con la onda parcial b_{51} .

La extensión del campo fuera de la superficie de la esfera metálica es aproximadamente de $a/10$, por otro lado se observa que el campo cercano es más intenso cuando $\gamma=0$, debido a que no hay absorción.

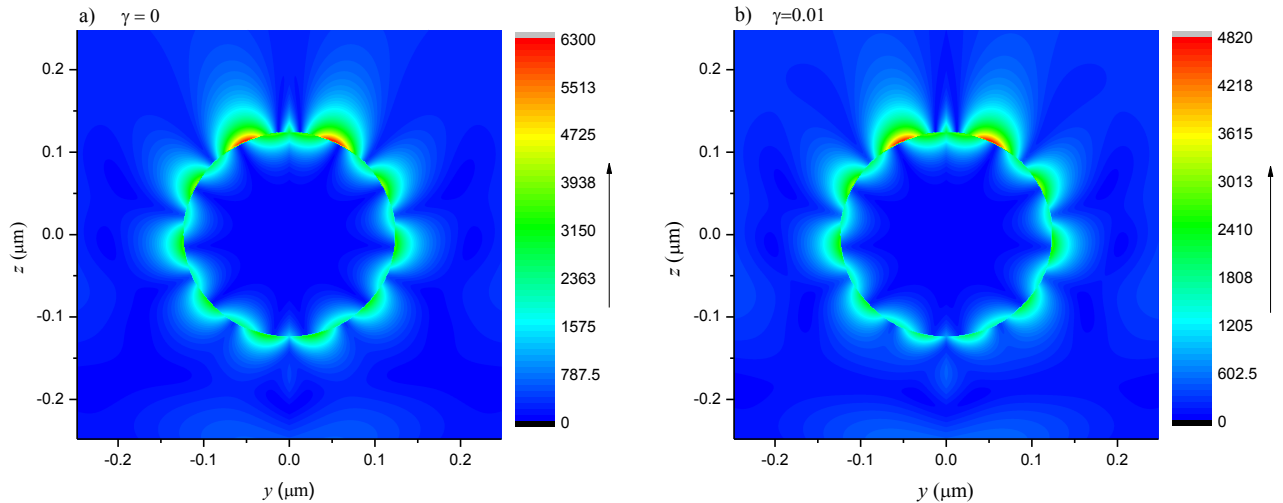


Figura 3.13. La intensidad del campo cercano proyectada en plano z - y por una esfera de radio $a = 2\pi c/\omega_p$, para $\gamma = 0.00$ y $\gamma = 0.01$ calculado a la frecuencia de resonancia $\omega a/c = 3.41$.

En las figuras 3.13 aparecen dos máximos de intensidad que no hemos podido explicar su naturaleza, solo un escrutinio detallado de la onda parcial asociada podrá tal vez dar la respuesta al punto. Aunque se intentó encontrar una relación entre el número de oscilaciones o lóbulos dentro de esfera con los parámetros involucrados, como por ejemplo el radio, la longitud de onda, etc., no encontramos alguna relación.

En la figura 3.14 se muestra el campo cercano proyectado en el plano z - y con $L=10$, radio $a = 2\pi c/\omega_p$, para los casos a) $\gamma = 0.00$ y b) $\gamma = 0.01$ para un frecuencia no resonante. El comportamiento del campo es completamente diferente comparado con el caso de la excitación del PS.

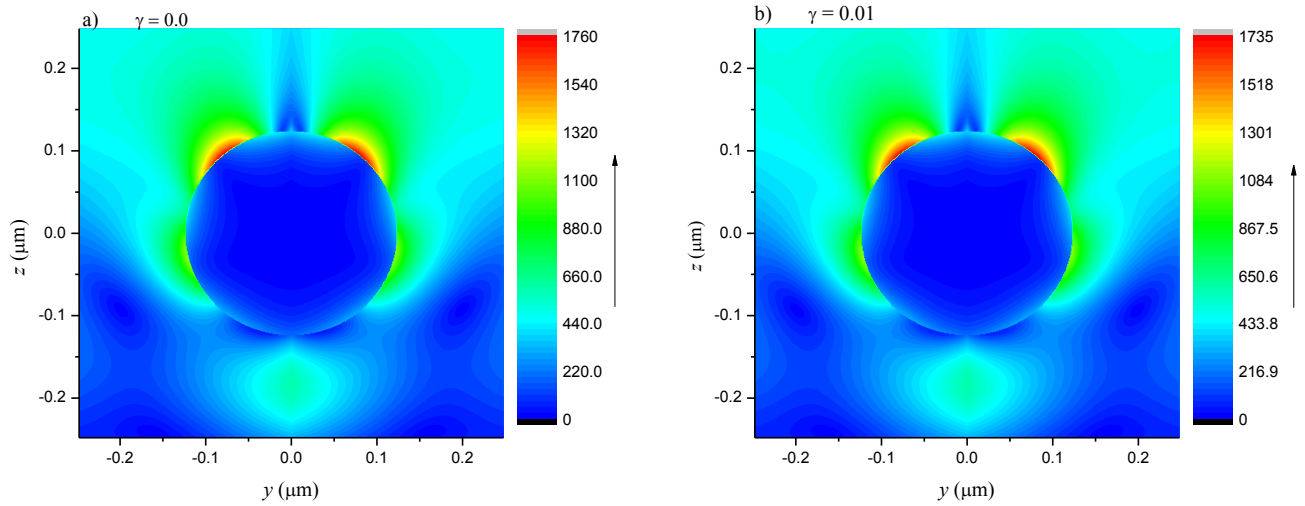


Figura 3.14 Se grafica lo mismo que en la figura 3.13 pero a una frecuencia no resonante $\omega a/c=2.18$.

Al igual que en la figura 3.13, en la figura 3.14 se puede observar dos máximos de intensidad, por lo que se puede decir que es un fenómeno que no depende de la resonancia.

En esta sección estudiamos la difracción de luz por esferas metálicas con comportamiento tipo Drude y el acoplamiento resonante de luz con los plasmones de superficie. Se analizaron esferas de dos diferentes tamaños, en la región de nanómetros, y se encontró un agrandamiento del campo eléctrico, así como un comportamiento dipolar.

3.2 Esferas-plano

Desde el punto de vista numérico este problema se complica demasiado con respecto al anterior. Ahora tenemos que resolver un sistema de ecuaciones de dimensión $4(L^2+2L) \times 4(L^2+2L)$, y además tenemos que calcular numéricamente una integral para cada elemento de la matriz. Esto trae como consecuencia del aumento exponencial del tiempo de cálculo y no ha sido posible probar convergencia como en el caso anterior. Solo se ha podido correr con $L=1$ y 2 . Además,

cabe señalar que el teorema de la adición-traslación requiere una suma “infinita” de coeficientes, en la cuestión computacional sólo podemos proveer en esta suma L coeficientes.

Como un resultado muy preliminar, en la figura 3.15 Se muestra el campo cercano del sistema esfera-plano proyectado sobre el plano z - y , para $L = 2$, un esfera dieléctrico de radio 10 nm y un índice de refracción de 1.5, el medio de la parte inferior ($z < 0$) es vidrio con un índice de 1.5 y el medio en la parte superior es aire con $n_2 = 1$.

El resultado que se esperaba es que el campo entre la esfera y plano fuera más intenso en esa región que en otras, debido a la simetría del sistema.

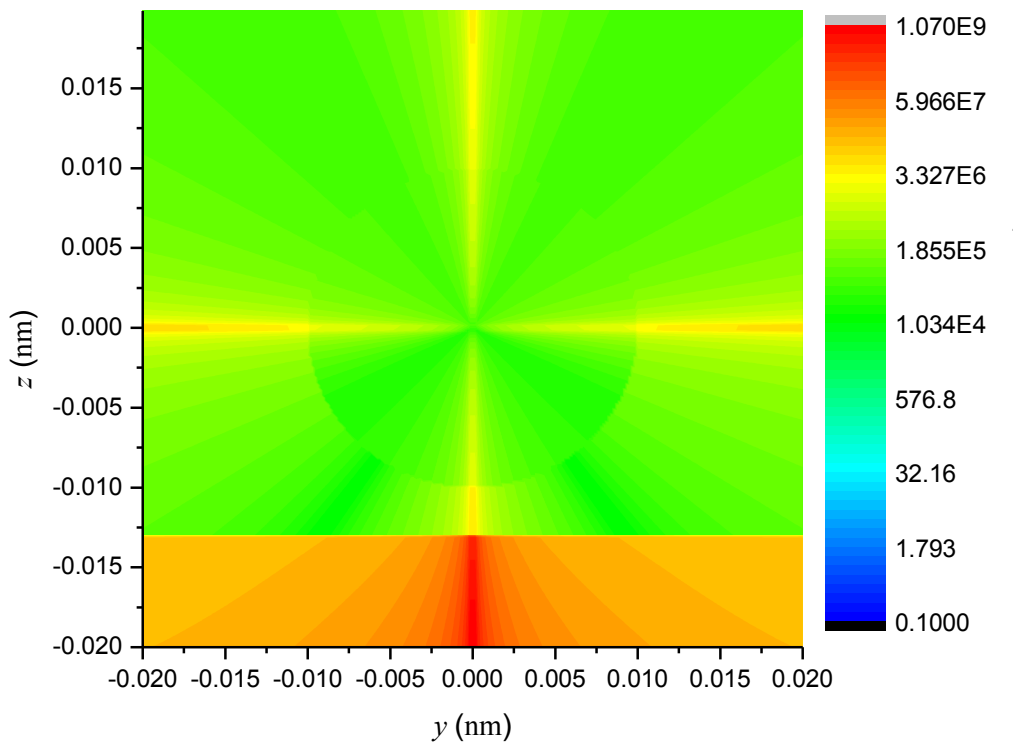


Figura 3.15. El campo cercano de una esfera dieléctrica de 10 nm de radio y $n_e = 1.5$, a una distancia de 13 nm del plano, medido desde el centro de la esfera. El medio de la parte inferior es vidrio $n_1 = 1.5$ y el superior es aire $n_2 = 1$. La longitud de la onda incidente es 633 nm.

En esta sección se mostró un resultado muy preliminar del campo cercano del sistema plano esfera. No se ha podido probar la convergencia debido a lo expuesto anteriormente.

Conclusiones y Perspectivas.

En esta tesis estudiamos el esparcimiento de luz y el campo cercano producido por una esfera sola y por un sistema formado por una esfera cerca de un plano que divide a dos medios semi-infinitos.

Se calculó el campo cercano de una esfera (metálica y dieléctrica) usando la teoría de Mie, así como también el campo lejano, secciones eficaces; se estudiaron para cada caso las resonancias.

Para el caso de esferas dieléctricas se observa que existe una máxima intensidad (foco) de la luz a lo largo de la dirección de propagación de la onda incidente. Para una longitud de onda fija se encontró que el foco se aleja de la esfera a medida que aumenta su tamaño.

Por otra parte, se logró excitar los WGM para los casos TM y TE donde se observa que para el caso TM los máximos son simétricos respecto al eje z , mientras que para el caso TE no sólo son simétricos sino también los máximos se encuentran a lo largo del eje de propagación.

Cuando se excita un WGM la intensidad del campo cercano aumenta porque se concentra en la superficie interior de la esfera; es 4 veces mayor para el caso TE y 60 veces para el caso TM estudiados, ambos comparado con la intensidad calculada en casos no resonantes.

Para el caso de esferas metálicas se asume que tiene un comportamiento tipo Drude para poder comparar con algunos resultados mostrados en la referencia [13] los cuales están en excelente acuerdo.

Se excitó un plasmón de superficie y se observa que los máximos de intensidad del campo eléctrico están muy cerca de la superficie, y son aproximadamente 20 veces mayores que los que los encontrados cuando no hay excitación. Además, en el estudio de la componente E_{ϕ}^s es mayor cuando hay resonancia en ángulos pequeños; así como una mayor presencia de lóbulos (máximos y mínimos).

Cuando el parámetro γ aumenta, las resonancias en la sección eficaz de extinción disminuyen su amplitud, e incluso desaparecen y el campo cercano es menos intenso; lo anterior se debe a que la esfera metálica absorbe energía en tales condiciones.

En el caso del problema sistema esfera-plano se utilizó el método de imágenes para tomar en cuenta el campo reflejado por el plano que proviene de la esfera real.

Se estudió y se aplicó el teorema de adición-traslación para escribir los campos esparcidos por la esfera imagen en el mismo sistema coordenado de la esfera real, y así poder aprovechar las propiedades de ortogonalidad de los armónicos esféricos vectoriales.

El problema de la difracción de una esfera cerca de un plano fue resuelto teóricamente. La parte numérica se complica debido a que el tiempo de cómputo crece, ya que ahora se resuelve un sistema lineal de ecuaciones donde cada elemento de matriz es una integral que debe ser resuelta numéricamente.

Cabe aclarar que en el proceso de la realización del presente trabajo se adquirieron conocimientos y herramientas computacionales (Fortran), los cuales eran nulos. Además la experiencia de hacer un trabajo de investigación.

Las perspectivas a futuro son:

- 1) Profundizar en el estudio de una esfera cerca de una interfaz plana que divide a dos medios semi-infinitos.
- 2) Estudio de la difracción de dos o más esferas en un mismo medio.
- 3) Estudio del esparcimiento de dos esferas cerca de una interfaz plana que divide a dos medios semi-infinitos.
- 4) Estudio del esparcimiento de varias esferas cerca de una película delgada metálica.
- 5) Estudio de cristales fotónicos tridimensionales.

Bibliografía

- 1) Ruey-Lin Chern, Xing-Xiang Liu, y Chien-Cheng Chang, “Particle plasmons of metal nanospheres: Application of multiple scattering approach”, *Phys. Rev. E* **78**, 016690 (2007).
- 2) Mie, G., “Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen,” Leipzig, *Ann. Phys.* **330**, 377–445 (1908)
- 3) Ashkin A. Dziedzic J., “Observation of resonances in the radiation pressure on dielectric spheres”, *Phys. Rev. Let.*, **38**, 1351-1354 (Jun1977).
- 4) Chýlek, P., Kiehl, J. and Ko, M., “Optical levitation and partial-wave resonances”, *Physical Review A* **18**, 2229-2233 (Nov 1978).
- 5) Boardman, A., *Electromagnetic Surface Modes*. John Wiley & Sons 1982.
- 6) Englman, R., and Ruppin, R., “Optical lattice vibrations in finite ionic crystal : I, *J.Phys. C* **1**, 614-629 (1968).
- 7) Fuchs, R., and Kliwer K., “Optical modes of vibrations in an ionic crystal sphere”, *J. Opt. Soc. Am.*, **58**,319-330 (March 1968).
- 8) Martinos, S., “Surface electromagnetic modes in metal spheres”, *Phys. Rev. B* **31**, 2029-2032. (Feb 1985).
- 9) Stout, B., Nevière, M., and Popov E., “Mie Scattering by anisotropic object. Part I. Homogeneous sphere”, *J. Opt. Soc. Am., A* **23**, 1111-1123 (2006).
- 10) Berg, M., J. Sorensen, C. M., and Chakrabarti, A., “Reflection symmetry of a sphere’s internal field and its consequences on scattering: microphysical approach”, *J. Opt. Soc. Am., A* **25**, 98-107. (2008)
- 11) Devilez, A., Bonod, N., Wenger, J., Gérard, D., Stout B., Rigneault, H., and Popov, E., “Three-dimensional subwavelength confinement of light with dielectric microspheres”, *Opt Exp* **17** , 2089-2094 (Feb 2009).
- 12) Derkachova, A. Kolwas, K., “Size dependence of multipolar plasmon resonance frequencies and damping rates in simple metal spherical nanoparticles”, *Eur. Phys. J. Special Topics* **144**, 93-99 (may2007).

- 13) S. Ancey, I. Décanini, A. Folacci, and P. Gabrielli, „Surface plasmon polaritons and surface phonon polaritons on metallic and semiconducting spheres: Exact and semiclassical descriptions,“ *J. Opt. Soc. Am. B* **26**, 1176–1187 (2009).
- 14) Ausman L. K., and Schatz G. C., “Whispering gallery mode resonators: Surface enhanced Raman scattering without plasmons”, *J. Chem. Phys.* **129** 054704-1-054704-10 (2008)
- 15) Shinya, A., and Fukui, M., “Finite-Difference Time-Domain Analysis of the Interaction of Gaussiann Evanescent Light With a Single Dielectric Sphere or Ordered Dielectric Spheres” *Opt. Rev.* **6**, 215-223 (1999)
- 16) Nkoma, J., “Surface modes of a sphere coupled to a semi-infinite medium”, *J. Phys. Condens. Matter.* **3**, 7857-7866 (1991).
- 17) Chew, H., Wang, D., and Kerker, M., “Elastic scattering of evanescent electromagnetic waves” *Appl. Opt.* **18**, 2679-2687 (1979).
- 18) Bobbert, P. A. and Vlieger, J., „Light scattering by a sphere on a substrate,“ *Physica (Utrecht)* **137A**, 209–242 (1986)
- 19) Lindell, I. V., Sihvola, A. H., Muinonen, K. O., and P. Barber, „Scattering by a small object close to an interface. I. Exact-image theory formulation,“ *J. Opt. Soc. Am. A* **8**, 472–476 (1991).
- 20) Videen, G., “Light Scattering from a sphere on or near a surface. *J. Opt. Soc. Am. A.* **8**, 483-489 (March 1991).
- 21) Videen, G. Errata *J. Opt. Soc. Am., A* **13** 326-337 (1992).
- 22) Videen, G., “Light Scattering from a sphere behind a surface”, *J. Opt. Soc. Am. A.* **10**, 110-117 (January 1993)
- 23) Johnson, B., “Light scattering from a spherical particle on a conducting plane: I. Normal incidence”, *J. Opt. Soc. Am., A.* **9**, 1341-1351 (August 1992).
- 24) Johnson, B. “Morphology-dependent resonances of a dielectric sphere on a conducting plane”, *J. Opt. Soc. Am., A* **11** 2055-2064. (1994)
- 25) Johnson, B., “Calculation of light scattering from a spherical particle on a surface by a multiple expansion method”, *J. Opt. Soc. Am. A.* **13** (February 1996)
- 26) Fucile, E., Denti, P., Borghese, F., Saija, R., and Sindoni, O. I., “Optical properties of a sphere in the vicinity of a plane surface” *J. Opt. Soc. Am. A.* **14**, 1505-1514 (1997).

- 27) Wriedt, T., and Doicu, A., "Light scattering from a particle on or near a surface" *Opt. Commun.* **152**, 376-384 (1998).
- 28) Ishikawa, H., Tamaru, H., and Miyano, K., "Microsphere resonator strongly coupled to a plane dielectric substrate: Coupling via the optical near field" *J. Opt. Soc. Am. A* **17**, 802-813 (2000).
- 29) Jory, M. J., El. Perkins, A., and Sambles, J. R., "Light scattering by microscopic spheres behind a glass-air interface" *J. Opt. Soc. Am. A* **20**, 1589-1594 (2003).
- 30) Heltzel, A., Theppakuttai, Chen, S. C., and Howell, J. R., "Surface plasmon-based nanopatterning assisted by gold nanospheres", *IOP Nanotechnology* **19**, 1-6 (December 2007).
- 31) Ohtsu M., *Near-Field Nano/Atom Optics and Technology*, Springer ed. 1998.
- 32) Zhu X., Ohtsu M., *Near-field optics: Principles and applications*. World Scientific 1999.
- 33) Courjon, D., *Near-field microscopy and near-field optics*. Imperial College Press 2003.
- 34) Novonty, L., Hecht B. *Principles of Nano-Optics*. Cambridge University Press 2006.
- 35) Jackson, J. D., *Classical Electrodynamics*. 3thed. Wiley 1999.
- 36) Durán Favela J. A., *Montaje y operación de un microscopio óptico de campo cercano*, Tesis de Maestría, Universidad de Sonora 2005.
- 37) Zenneck, J., "Fortpflanzung ebener elektromagnetischer Wellen längs einer ebenen Leiterfläche," *Ann. Phys.* **23**, 846-866 (1907).
- 38) van del Hulst, H. C., *Light scattering by small particles*, Dover 1957.
- 39) Born, M. and Wolf, E., *Principles of optics*. 7th edition Cambridge University Press 2001.
- 40) Bohren C., and Huffman D., *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley 1983.
- 41) Liu M., Guyot-Sionnest, P., Lee, T., and Gray, S. K., "Optical properties of rodlike and bipyramidal gold nanoparticles from three-dimensional computations", *Phys. Rev. B* **76**, 23548 1-10 (2007).
- 42) Mackowski D., Analysis of radiative scattering for multiple sphere configurations, *Proc. R. Soc. Lond. A* (1991) **433**, 599-614.