

UNIVERSIDAD DE SONORA
DIVISION DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Departamento de Investigación en Física



“ÓPTICA DE NANOESTRUCTURAS METÁLICAS EN
SUPERFICIES”

TESIS PRESENTADA PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO
EN CIENCIAS (FÍSICAS)

PRESENTA:

LUIS ANGEL MAYORAL ASTORGA

Hermosillo, Sonora. México.

Agosto de 2009

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

UNIVERSIDAD DE SONORA
DIVISION DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Departamento de Investigación en Física



“ÓPTICA DE NANOESTRUCTURAS METÁLICAS EN
SUPERFICIES”

TESIS PRESENTADA POR
LUIS ANGEL MAYORAL ASTORGA
COMO REQUISITO PARCIAL
PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO
EN CIENCIAS (FÍSICAS)

JURADO CALIFICADOR
DR. JORGE ALBERTO GASPAR ARMENTA

PRESIDENTE

DR. RAÚL GARCÍA LLAMAS

VOCAL

DR. ADALBERTO CORELLA MADUEÑO

VOCAL

DR. FELIPE RAMOS MENDIETA

SECRETARIO

Tesis sustentada por

Luis Angel Mayoral Astorga

como requisito parcial para obtener el grado de
Maestro en Ciencias (Físicas).

Aceptada por el Departamento de Investigación en Física

Dr. Adalberto Corella Madueño
Vocal

Dr. Raúl García Llamas
Vocal

Dr. Jorge Alberto Gaspar
Armenta
Presidente

Dr. Felipe Ramos Mendieta
Secretario

Dr. Alvaro Posadas
Coordinador Del Programa

19 de Agosto de 2009

- Agradecemos al Area de Cómputo de Alto Rendimiento de la Universidad de Sonora por haber dado acceso al cluster Mezquite, para la realización de varios cálculos.
- Agradecemos el apoyo recibido de CONACYT a través del proyecto de investigación SEP-2006/60917, cuyo responsable es el Dr. Jorge A. Gaspar Armenta.

Índice general

1. Introducción	1
2. Antecedentes	5
2.1. Historia	5
2.2. Ecuaciones de Maxwell y la ecuación de onda	7
2.3. Luz polarizada	10
2.4. Dimensiones del problema	11
3. Modos normales de una interfaz metal-dieléctrico	15
3.1. El problema de una interfaz $\epsilon_1 - \epsilon_2$	15
3.1.1. Polarización TE o S	16
3.1.2. Polarización TM o P	18
3.2. Modos normales	20
3.3. Campo evanescente	22
3.4. Modelo de Drude de la función dieléctrica de un metal	23
3.5. Relación de dispersión del plasmón de superficie	25
3.6. Excitación del plasmón de superficie	26
4. Método de diferencias finitas en el dominio temporal	30
4.1. Algo de historia	31

4.2. Expresiones básicas del FDTD	31
4.3. Estabilidad	34
4.4. Capa de acoplamiento perfecto (PML)	35
4.5. Formulación con diferentes medios	37
4.5.1. Dieléctrico con pérdidas	37
4.5.2. Metal con pérdidas	39
4.6. Fuentes	40
4.6.1. Fuente suave y dura	40
4.6.2. Paquete gaussiano	43
4.6.3. Haz	47
4.6.4. Fuente evanescente	49
4.7. Transformada de Fourier discreta	51
4.8. Validación de la implementación del FDTD	52
4.8.1. 1D	52
4.8.2. 2D	57
5. Interacción de un plasmón de superficie con una discontinuidad en la superficie del metal	63
5.1. Motivación del problema	63
5.2. Estudio de plasmones de superficie con FDTD	64
5.3. Excitación del plasmón de superficie con una fuente evanescente	66
5.4. Sobre el decaimiento radiativo del plasmón de superficie	73
5.5. Excitación del plasmón de superficie con campo inhomogéneo	75
6. Conclusiones	81
A. Ortogonalidad de los campos \vec{E}, \vec{B} y vector de onda \vec{k}	83

Índice general	III
B. Velocidad de fase	85
C. Función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ para medios absorbentes	87
D. Transformada de Fourier	89
D.1. Teoremas útiles de la transformada de Fourier	89
D.2. Transformada de Fourier de un pulso gaussiano	91
D.3. Transformada de Fourier de un paquete gaussiano	93
D.4. Transformada de Fourier de $\vec{D}(\omega)$ para medios dispersivos	94
E. Radiación debida a un cilindro de radio R	98
Bibliografía	100

Índice de Tablas

4.1. Valores de \varkappa para $\beta = 1$ que definen las frecuencias centrales de los paquetes gaussiano	57
4.2. Valores de los ángulos de los 3 primeros órdenes de difracción para diferentes longitudes de onda incidente	58
4.3. Valores de los ángulos de los 3 primeros órdenes de difracción para diferentes longitudes de onda incidente calculados en el FDTD	60

Índice de figuras

2.1. Luz como una onda transversal	10
2.2. Definición de plano de incidencia	11
2.3. Plano de incidencia para luz polarizada lineal TE y TM	12
2.4. Sistema unidimensional	13
2.5. Sistema con simetría bidimensional	13
2.6. Sistema tridimensional	14
3.1. Reflexión y refracción de ondas electromagnéticas con polarización TE de la luz incidente	16
3.2. Componentes paralela y transversal de \vec{k}	18
3.3. Reflexión y refracción de ondas electromagnéticas con polarización TM de la luz incidente	19
3.4. Campo evanescente a lo lejos de la interfaz y oscilatorio a lo largo de ésta	22
3.5. Función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ de Drude para la plata	24
3.6. Relación de dispersión para modos normales de una interfaz Vacío-Metal	27
3.7. Acoplamiento por rejilla	28
3.8. Acoplamiento por ATR configuración Otto	29
4.1. Celda de Yee	33
4.2. Problema típico con PMLs	35

4.3. Fuente Gaussiana en 1D	41
4.4. Fuente dura: Pulso gaussiano chocando con un dieléctrico	42
4.5. Fuente suave: Pulso gaussiano chocando con un dieléctrico	42
4.6. Amplitud normalizada de TF de un paquete gaussiano para $f_0 = \alpha\sigma_f$.	45
4.7. Definición de una fuente tipo haz en 2D para FDTD	47
4.8. Evolución de la desviación estandar para una fuente tipo haz	49
4.9. Formulación de una haz inclinado dentro del FDTD	50
4.10. Fuente evanescente creada en el FDTD	51
4.11. Medios infinitos en dirección \hat{i} y \hat{k} que forman un película de grosor d en la dirección \hat{j}	53
4.12. Desplazamiento del espectro en frecuencias del campo incidente al variar la frecuencia central de éste	55
4.13. Coeficiente de reflexión R para una película de metal con $f_p = 912.60582 \times$ $10^{12}1/s$ y con un grosor d	58
4.14. Barra de metal de largo H y ancho A con rejillas en un lado	59
4.15. Campo $ H_z $ a lo largo de una distancia y fija de la barra de metal para ver el centro de los haces difractados	61
4.16. Haces difractados para diferentes longitudes de onda incidentes en el FDTD	62
5.1. Distancia a la cual el campo evanescente decae al $\frac{1}{e}$ % en el vacío	65
5.2. Fuente evanescente con polarización S con $\omega = 0.5\omega_p$, $k_{\parallel} = -0.6k_p$ y su máximo en $t = 4\sigma_t$	66
5.3. Indeterminación del plasmón de superficie excitado con una fuente eva- nescente	67
5.4. Parámetros del campo evanescente incidente con perfil gaussiano en el tiempo y el espacio	70

5.5. Plasmón de superficie excitado con una fuente envanescente con polarización P con $\alpha = 0.5$, $\beta = 5$, $\eta = 2$ y con $k_{\parallel} = -0.61k_p$	71
5.6. Campo H_z a lo largo de la interfaz vacío-metal	72
5.7. Campo normalizado a lo lejos de la interfaz vacío-metal	73
5.8. Amplitud del campo magnético de una fuente puntual calculado con funciones Hankel	77
5.9. Espectro en k de una fuente puntual	78
5.10. Plasmón de superficie excitado con una fuente puntual	79
5.11. Campo a lo largo de la interfaz metal-dieléctrico y a lo lejos de ésta	80
D.1. Contorno de integración de la integral $m(t)$	97

Capítulo 1

Introducción

El estudio de plasmones de superficie y su interacción con nanoestructuras ha cobrado un renovado interés debido a su potencial aplicación en el guiado de información en circuitos ópticos que contienen guías con anchos menores a la longitud de onda utilizada [1] [2] [3].

En la fabricación de circuitos ópticos integrados, los metales no son usualmente útiles, excepto tal vez como espejos. Sin embargo, a raíz de varios trabajos claves [4] [5], se entiende actualmente que las estructuras metálicas pueden proveer maneras únicas de manipular la luz a escalas de longitudes menores que la longitud de onda [6] dando lugar a dos nuevas áreas de investigación llamadas plasmonics y metamateriales. En la utilización de los plasmones de superficie para la propagación de información, se vuelve muy importante el conocer en detalle la interacción de estos modos con obstáculos que se encuentren en su camino [6]. Dependiendo de su tamaño o configuración los efectos de estos obstáculos pueden ser muy diversos[7][8].

Los metales tienen ciertas propiedades físicas características debidas a que los electrones exteriores están ligados sólo ligeramente a los átomos, formando una especie de mar (también conocido como mar de Drude), que se conoce como enlace metálico. Cuando un metal es sometido a un campo eléctrico estático, los portadores de carga

que forman el mar de Drude se distribuyen rápidamente de tal manera que el metal se blindará del campo. Esto último le atribuye a los metales el carácter de plasma, por algunos llamados el cuarto estado de la materia.

Rufus Ritchie predijo que partículas cargadas moviéndose rápidamente pueden excitar ondas superficiales sobre láminas de metal debido a que las ondas electromagnéticas que viajan a través de un medio polarizable son modificadas por la polarización que inducen y se acoplan a ella [9]. Este modo acoplado de excitación es llamado polaritón. Es decir, un polaritón es el modo resultante de la mezcla de un fotón con una excitación de un material.

Los polaritones más comunes son polaritón fonón, resultado del acoplamiento de un fotón infrarrojo con un fonón óptico; polaritón excitón, resultado del acoplamiento de la luz visible con un excitón; polaritón intersubbanda, resultado de un fotón infrarrojo o del orden de los terahertz con un excitón de interbanda; y el plasmón polaritón de superficie-, resultado del acoplamiento de un plasmón de superficie con la luz.

Los plasmones polaritones de superficie, así como todos los demás fenómenos electromagnéticos, surgen como soluciones de las ecuaciones de Maxwell aplicadas a una geometría dada. Las ecuaciones de Maxwell son un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas que se relacionan con fuentes (cargas y corrientes) con campos y flujos electromagnéticos. Las soluciones analíticas cerradas solo son conocidas para un número determinado de casos especiales, los cuales son difícilmente aplicables a problemas reales. En su lugar, se emplean aproximaciones más o menos crudas en los intentos para saltar el vacío entre la teoría y las aplicaciones avanzadas. El advenimiento de las computadoras ha cambiado nuestra habilidad con las ecuaciones de Maxwell de forma profunda. Con una poderosa computadora a la mano es más atractivo usar métodos computacionales, los cuales pueden tratar diferentes tipos de problemas sin modificación alguna en el algoritmo computacional o el programa. La parte del electromagnetis-

mo que oferta con los métodos computacionales es conocido como electromagnetismo computacional (o en sus siglas en ingles, CEM).

La funcionalidad de las herramientas de CEM crece rápidamente. Una de las razones es el constante crecimiento de las capacidades computacionales en la última mitad del siglo XX. Otra importante razón es la mejora de los algoritmos, cuyo caso son los métodos basados en diferencias finitas (FD) (usualmente en el dominio del tiempo).

Los métodos de diferencias finitas es una manera más o menos directa de resolver las ecuaciones de Maxwell en su forma discretizada, usando los componentes del campo, en una cuadrícula (grid) de puntos. Las diferencias finitas, en general, y el método particular de diferencias finitas en el dominio del tiempo (DFDT) mejor conocido por su acrónimo FDTD del idioma inglés , son muy eficientes y requieren pocas operaciones por punto[10].

En particular, el FDTD es apropiado para estudiar la interacción de luz con sistemas finitos con geometrías arbitrarias. Uno de estos sistemas es una placa metálica, y un problema que ha sido estudiado de diferentes puntos de vista[11, 12, 13, 14, 15] es el de un plasmón de superficie que se propaga hasta llegar donde termina dicha barra. Se sabe que el plasmón de superficie se difracta generando radiación en la esquina[11, 13] y además puede ocurrir reflexión[11, 12] y también la generación de un plasmón de superficie en el otro lado de la esquina de la placa[14, 15].

En esta tesis estudiamos el fenómeno de plasmones de superficie excitados con una fuente evanescente creada artificialmente dentro del FDTD. La finalidad de este trabajo de tesis es estudiar la interacción de los plasmones de superficie con la esquina de una barra de metálica, poniendo énfasis en la transmisión de un plasmón de superficie de una superficie a la superficie de al lado. Este resultado es importante puesto que no son necesarios la periodicidad o un agujero o slit para generar un plasmón de superficie en una guía metálica. Demostramos que el campo fuertemente inhomogéneo de la onda

radiada en la esquina, genera las condiciones para producir plasmnes de superficie en la superficie de al lado.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1. Historia

Los sabios de diferentes épocas han tratado de explicar los fenómenos físicos donde interviene la luz así como la naturaleza de ésta. El desarrollo de estas teorías se remonta hasta la época de los filósofos griegos, quienes suponían que la luz emanaba de los objetos que al llegar al ojo del observador le permitía verlo. Pero no fue sino hasta que en la Europa del siglo XVII al XIX cuando surgieron muchos matemáticos y físicos que produjeron importantes trabajos sobre la luz y los fenómenos luminosos.

Teoría corpuscular: Newton trato de interpretar los fenómenos luminosos basado en principios mecánicos. Así supuso que la luz estaba constituida por corpúsculos emitidos por los cuerpos luminosos. La reflexión de la luz quedaría explicada como el “rebote” sobre la superficie de esos corpúsculos. Esta teoría fue aceptada hasta la mitad del siglo XVII.

Teoría ondulatoria:

1. Huygens en 1678 propuso la teoría ondulatoria de la luz; está constituida por ondas esféricas longitudinales que se transmiten en un medio homogéneo.

Esta teoría no pudo explicar la interferencia.

2. Young (1800). Mediante dos finas fuentes luminosas muy cercanas, obtuvo una imagen “acuática” de la luz: interferencias. Había que admitir ondas transversales.
3. Fresnel (1820). Sintetiza a Huygens y Young:
 - Toda fuente luminosa está compuesta por oscilaciones que efectúan vibraciones periódicas amortiguadas. Cada oscilación tiene su frecuencia. Si los periodos y las fases son independientes, entonces las vibraciones son incoherentes.
 - La transmisión de la energía de la fuente luminosa se efectúa por ondas transversales.
 - En el vacío la velocidad de propagación es de $3 \times 10^8 m/s$ medida hecha por Foucault.
 - El órgano receptor es el ojo cuya gama visible es de $0.4\mu m$ a $0.8\mu m$ en longitud de onda.
4. Maxwell en 1865 propuso la teoría electromagnética de la luz; todo emisor luminoso produce un campo magnético oscilante perpendicular a otro eléctrico también oscilante, siendo la dirección de propagación perpendicular a ambos.

Teoría cuántica: Plank en 1900 afirmó que los osciladores luminosos debían de transmitir la energía en cantidades separadas que llamó cuantos. Gilbert Newton Lewis redefinió esos cuantos como fotones en 1926. Einstein fue el primero en sugerir que el comportamiento ondulatorio, el cual percibimos de forma macroscópica, es una manifestación estadística del fenómeno microscópico granular fundamental que es la luz. Dicha teoría es una admirable síntesis de la corpuscular y ondulatoria.

Dada la naturaleza macroscópica de los efectos considerados para este trabajo es suficiente con tener en consideración la naturaleza ondulatoria de la luz. En este capítulo se desarrollarán los conceptos que se utilizarán en los capítulos siguientes para referirse a la luz incidente.

2.2. Ecuaciones de Maxwell y la ecuación de onda

Uno de los triunfos más grandes de la teoría ondulatoria de la luz propuesta por James Clerk Maxwell fue que pudo expresar la velocidad de la luz en términos de las propiedades eléctricas y magnéticas del medio por donde se propaga. Por otra parte, igualmente importante, es posible deducir una ecuación de onda a partir de las ecuaciones de Maxwell.

La Ecuación de onda es una ecuación parcial diferencial de segundo orden que describe la propagación de las ondas, tales como las del sonido y la luz. Para el caso particular de la luz, la ecuación de onda esta contenida dentro de las ecuaciones de Maxwell y su forma general es:

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} = \hat{D}\vec{W} + \vec{S} \quad (2.1)$$

Donde $\vec{W}(\vec{x}, t)$ es algún campo vectorial que caracteriza las soluciones de la ecuación; \hat{D} es algún operador diferencial, que se definirá más adelante; y $\vec{S}(\vec{x}, t)$ es el término que contiene las fuentes.

Las ecuaciones de Maxwell representan la unificación fundamental de la teoría del campo eléctrico y magnético, y estas también predicen los fenómenos electromagnéticos. Las ecuaciones de Maxwell en su forma diferencial, usando el sistema internacional de unidades MKS, son:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (2.4)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.5)$$

Donde: \vec{E} es el campo eléctrico, \vec{D} es el vector de desplazamiento eléctrico, \vec{H} es el campo magnético, \vec{B} es la densidad de flujo magnético, ρ es la densidad de carga eléctrica y \vec{J} es la densidad de corriente. $\vec{D}(\vec{x}, t)$ y $\vec{E}(\vec{x}, t)$ están relacionados a través de las llamadas relaciones constitutivas por medio de las propiedades del medio en \vec{x} , expresado en la función dieléctrica $\epsilon(t)$. De igual forma \vec{B} y \vec{H} tienen una relación constitutiva por medio de $\mu(t)$. Aunque $\epsilon(t)$ y $\mu(t)$ son funciones del tiempo, se acostumbra escribir su contraparte en el espacio de la frecuencia angular. Sin embargo, para utilizarlas en el FDTD tendremos que transformarlas de nuevo al espacio temporal.

$$\begin{aligned} \vec{D}(\omega) &= \epsilon(\omega) \vec{E}(\omega) \\ \vec{B}(\omega) &= \mu(\omega) \vec{H}(\omega) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Donde $\epsilon(\omega)$ es la permitividad eléctrica y $\mu(\omega)$ es la permeabilidad magnética, que para medios homogéneos, isotrópicos, no dispersivos y lineales se reducen a un número que caracteriza el comportamiento de los materiales ante los campos eléctricos y magnéticos. Para el vacío $\epsilon = \epsilon_0$ y $\mu = \mu_0$. Se acostumbra clasificar los materiales por sus valores relativos de permitividad eléctrica y permeabilidad magnética,

$$\begin{aligned} \epsilon_r &= \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \\ \mu_r &= \frac{\mu}{\mu_0} \end{aligned} \quad (2.7)$$

de forma que para el vacío:

$$\begin{aligned} \epsilon_r &= 1 \\ \mu_r &= 1 \end{aligned} \quad (2.8)$$

Las ecuaciones de Maxwell se pueden escribir en la forma (2.1):

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \\ -\frac{1}{\mu} \nabla \times & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{1}{\epsilon} \vec{J} \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{D} \vec{W} + \vec{S} \quad (2.9)$$

Donde se definió el operador diferencial:

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \\ -\frac{1}{\mu} \nabla \times & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

y el término que contiene las fuentes:

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\epsilon} \vec{J} \times \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Las ecuaciones (2.4) y (2.5) no son incluidas ya que solo expresan las restricciones (condiciones iniciales) de los campos que son preservadas por las ecuaciones dinámicas (2.2) y (2.3). Considerando soluciones armónicas de la ecuación de onda de la forma:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}_0(\vec{x}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (2.12)$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{B}_0(\vec{x}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (2.13)$$

lo cual no afecta la generalidad de las soluciones. Es posible desacoplar este sistema de ecuaciones al hacer $\hat{S} = 0$ (sin fuentes) y operar dos veces \hat{D} a ambos lados. El sistema de ecuaciones resultante es:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \left(\frac{1}{\mu} \nabla \times \right) & 0 \\ 0 & \frac{1}{\mu} \nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon} \nabla \times \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Esta última formulación (2.14) es la más común y conveniente en la que se escribe la ecuación de onda para el problema electromagnético libre de cargas. Sin embargo resulta más sencillo resolver la ecuación (2.9), que como se verá en el capítulo 4 es el corazón del método FDTD.

2.3. Luz polarizada

La luz expresada en términos ondulatorios es una onda transversal, es decir que la dirección de oscilación de éstas es perpendicular a su dirección de propagación (ver figura 2.1). Matemáticamente se puede expresar esto a partir de la ecuación (2.2) (ver apéndice A):

$$\vec{B} = \frac{\vec{k} \times \vec{E}}{\omega} \quad (2.15)$$

La forma en la que se clasifica una polarización o se dice que la luz está polarizada es determinando la dirección de oscilación del campo \vec{E} . Existen muchas combinaciones posibles que pueden tomar estas oscilaciones, que van desde no tener una dirección preferencial de oscilación (luz natural o no polarizada) hasta en tener una dirección constante de oscilación (polarización lineal).

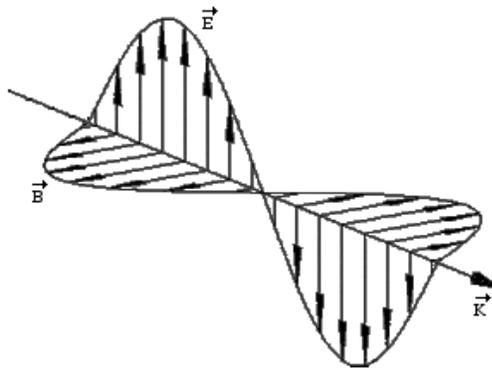


Figura 2.1: Luz como una onda transversal, donde el campo \vec{E} y \vec{B} oscilan de forma perpendicular entre ellos y ambos en forma perpendicular a la dirección de propagación \vec{k}

La polarización lineal resulta de gran importancia ya que es posible clasificar dos formas extremas en que pueden oscilar los campos cuando la luz incide en un medio material. Estos casos extremos se clasifican dependiendo de la forma en que el campo \vec{E} oscila con respecto al plano de incidencia. El plano de incidencia es el plano formado

por el vector de onda \vec{k} incidente y la normal \vec{n} a la superficie del medio donde incide la luz (figura 2.2).

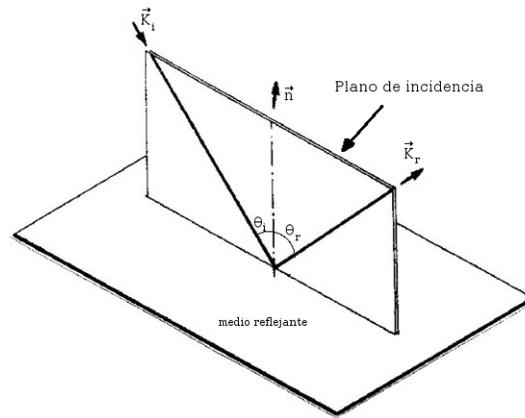


Figura 2.2: Definición de plano de incidencia. Donde: \vec{n} es un vector normal a la superficie del medio reflejante, \vec{k}_i es el vector de onda incidente, \vec{k}_r es el vector de onda reflejado, θ_i es el ángulo de incidencia y θ_r es el ángulo del haz reflejado.

- La luz tiene polarización lineal transversal magnética cuando el campo \vec{E} oscila de forma paralela al plano de incidencia (figura 2.3.a).
- La luz tiene polarización lineal transversal eléctrica cuando el campo \vec{E} oscila de forma perpendicular al plano de incidencia (figura 2.3.b).

Es importante señalar que cuando se fija una dirección preferente para uno de los campos, el otro queda determinado por (2.15).

2.4. Dimensiones del problema

Cuando se estudia un sistema físico bien determinado es conveniente tratar de simplificar el problema real a uno más sencillo. Una de las formas más usadas de reducir la complejidad en la física es buscar simetrías en la geometría del problema. El concepto de

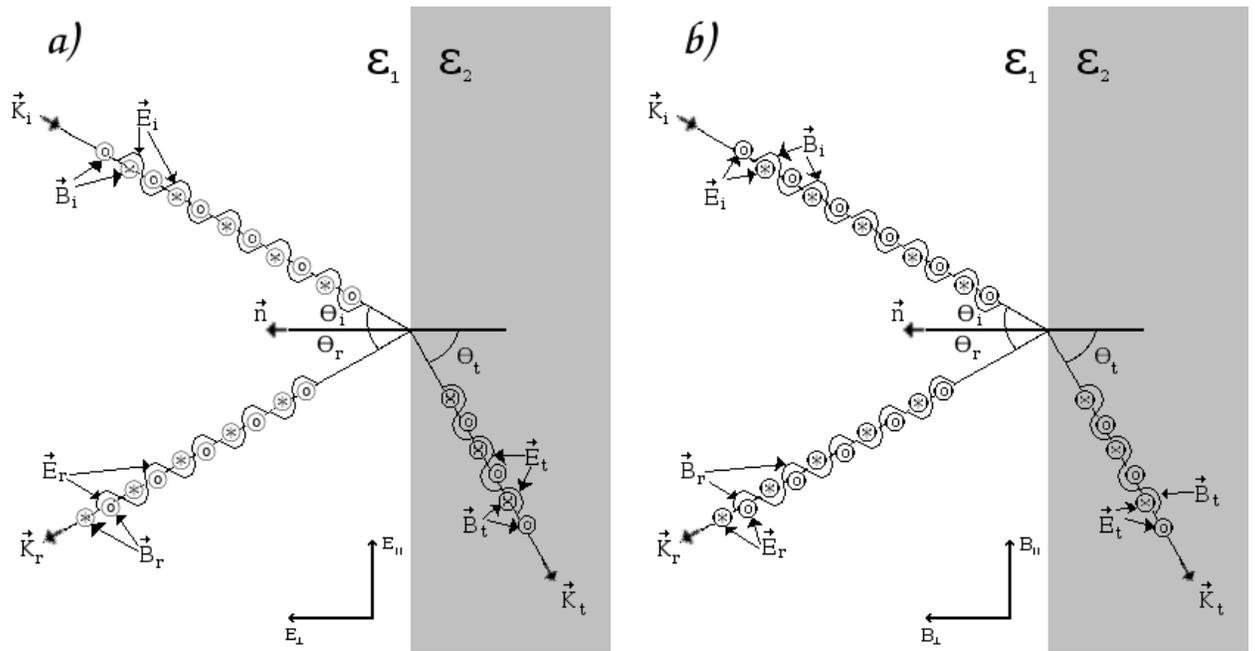


Figura 2.3: Plano de incidencia para luz polarizada linealmente a)TM: El campo \vec{B} oscila perpendicular al plano de incidencia. \otimes representa los máximos de las oscilaciones de \vec{B} (hacia afuera de la página), \odot representa los mínimos de las oscilaciones de \vec{B} (hacia adentro de la página) y \vec{E} oscila de forma que sus componentes sobre el plano formado con la normal \hat{n} y el vector de onda \vec{k}_i b)TE: El campo \vec{E} oscila perpendicular al plano de incidencia. \otimes representa los máximos de las oscilaciones de \vec{E} (hacia afuera de la página), \odot representa los mínimos de las oscilaciones de \vec{E} (hacia adentro de la página) y \vec{B} oscila de forma que sus componentes están sobre el plano formado con la normal \hat{n} y el vector de onda \vec{k}_i .

simetría es muy amplio, pero para fines prácticos de este trabajo tomaremos la simetría de la siguiente forma: Un objeto tiene simetría en una dirección dada si al trasladarnos en dicha dirección no encontramos ningún cambio en la forma que vemos el objeto. Para establecer las simetrías nos concentraremos en el valor de la permitividad eléctrica de los medios, que en el presente trabajo son isotrópicos. Por ejemplo, considerando medios homogéneos dispuestos según la configuración de la figura 2.4.a. Si trasladamos el sistema una distancia arbitraria en la dirección \hat{i} o en \hat{k} vemos solo un medio, pero si nos trasladamos en \hat{j} nos encontramos en un medio o en otro dependiendo del valor de

la coordenada en esa dirección. Se dice que el sistema tiene simetría en \hat{i} y en \hat{k} o que hay dependencia en la dirección \hat{j} . Entonces el sistema se reduce a 2.4.b.

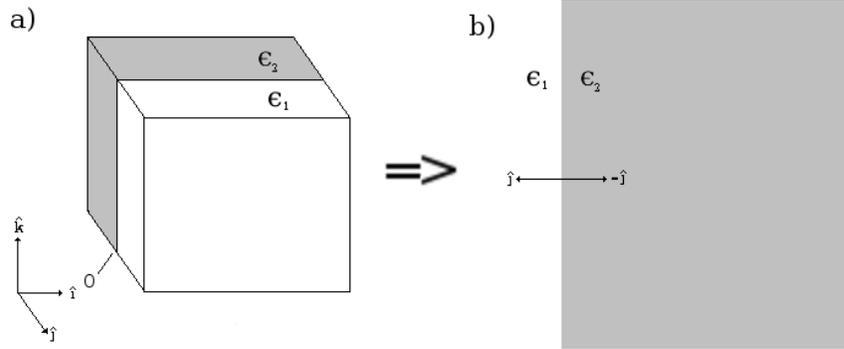


Figura 2.4: Sistema unidimensional: a) vista tridimensional en forma de cubo de lado infinito de dos medios semiinfinitos. b) Sistema simplificado a 1D.

En la figura 2.5.a se muestra un sistema formado por medios en forma de barras de altura infinita en dirección \hat{k} con dos posibles valores de permitividad. La única dirección en la que no se observa cambio al trasladarnos es en \hat{k} , por lo que el sistema se reduce a un plano (2.5.b). Se dice que el problema se redujo a 2D. En la figura 2.6

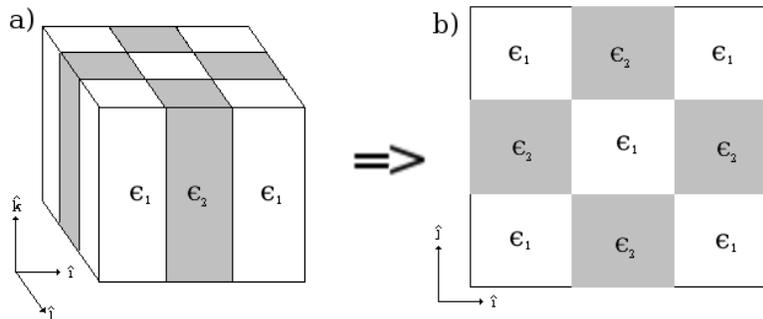


Figura 2.5: Sistema con simetría bidimensional: a) vista tridimensional en forma de cubo de lado infinito con barras de diferentes medios de altura infinita. b) Sistema simplificado a 2D.

se muestra un sistema que no puede ser simplificado. Se dice que este problema está en 3D. El sistema físico de interés en el presente trabajo será en 2D.

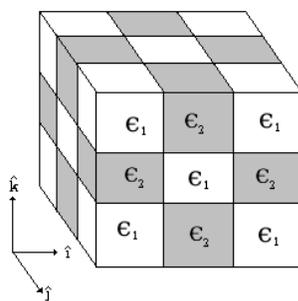


Figura 2.6: Sistema tridimensional formado de cubos de diferentes medios.

Capítulo 3

Modos normales de una interfaz metal-dieléctrico

3.1. El problema de una interfaz $\epsilon_1 - \epsilon_2$

El problema de una interfaz entre dos medios es particularmente familiar ya que siempre esta incluido en los cursos de óptica y electromagnetismo. La importancia de este problema reside en que la luz usualmente entra a un medio a través de una frontera o interfaz y que además se deducen importantes resultados como:

- La ley de reflexión: El ángulo de reflexión es igual al ángulo de incidencia
- La ley de Snell: $\frac{\sin i}{\sin r} = \frac{n'}{n}$. Donde i, r son el ángulo de incidencia y de refracción, y n, n' son los correspondientes índices de refracción.

Para simplificar el problema se consideran solamente medios semi-infinitos (problema en 1D), homogéneos, isotrópicos y no magnéticos ($\mu_r = 1$). Con estas consideraciones el problema es analíticamente soluble con ondas planas. El problema involucra 3 ondas planas: La incidente, la reflejada y la transmitida. Nos limitaremos solo a calcular los coeficientes de reflexión para después relacionarlos con los modos de superficie en una sección posterior.

3.1.1. Polarización TE o S

Si consideramos primero el problema con polarización TE con $\vec{E} = E_z \hat{k}$ y un ángulo de incidencia θ_i , el plano de incidencia con los campos quedan definidos por la figura 3.1.

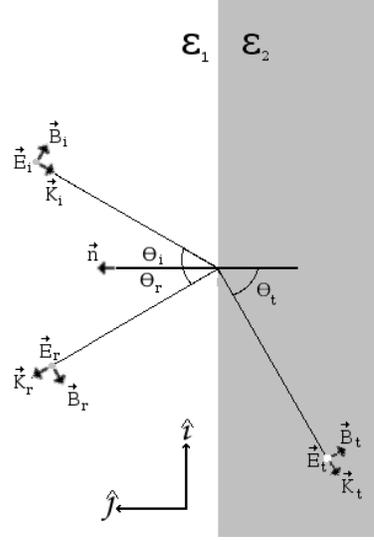


Figura 3.1: Reflexión y refracción de ondas electromagnéticas con polarización TE de la luz incidente. Donde: $\vec{k}_i, \vec{k}_r, \vec{k}_t$ son las direcciones de propagación del campo incidente, reflejado y refractado respectivamente. La orientación de los campos $\vec{B}_i, \vec{B}_r, \vec{B}_t$ se escogen de forma que den un flujo positivo de energía en la dirección de propagación. El campo \vec{E} siempre está en dirección \hat{z} .

Escribiendo los campos asociados a cada una de estas ondas:

Incidente:

$$\vec{E}_i = E_{zi} \hat{z} e^{i(\vec{k}_i \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.1)$$

$$\vec{B}_i = \left(B_{xi} \hat{i} + B_{yi} \hat{j} \right) e^{i(\vec{k}_i \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.2)$$

Reflejado:

$$\vec{E}_r = E_{zr} \hat{z} e^{i(\vec{k}_r \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.3)$$

$$\vec{B}_r = \left(B_{xr} \hat{i} + B_{yr} \hat{j} \right) e^{i(\vec{k}_r \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.4)$$

Transmitido:

$$\vec{E}_t = E_{zt} \hat{z} e^{i(\vec{k}_t \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.5)$$

$$\vec{B}_t = \left(B_{xt} \hat{i} + B_{yt} \hat{j} \right) e^{i(\vec{k}_t \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.6)$$

Aplicando las condiciones de frontera:

Todos los campos deben de ser iguales en todo tiempo en $z=0$. De forma que deben estar en fase:

$$\begin{aligned} \left(\vec{k}_i \cdot \vec{x} \right)_{z=0} &= \left(\vec{k}_r \cdot \vec{x} \right)_{z=0} = \left(\vec{k}_t \cdot \vec{x} \right)_{z=0} \\ k_i \sin \theta_i &= k_r \sin \theta_r = k_t \sin \theta_t \end{aligned} \quad (3.7)$$

Dado que $k = \omega \sqrt{\epsilon}$ entonces $k_i = k_r$ y por lo tanto también se cumple que $\theta_i = \theta_r$ y por consiguiente se tiene:

$$k_i \sin \theta_i = k_t \sin \theta_t \quad (3.8)$$

Que es conocida como la ley de Snell.

1. De la continuidad de la componente tangencial de \vec{E} en $z=0$.

$$\begin{aligned} \left(\vec{E}_i + \vec{E}_r - \vec{E}_t \right) \times \hat{n} &= 0 \\ E_{zi} + E_{zr} &= E_{zt} \end{aligned} \quad (3.9)$$

2. De la continuidad de la componente tangencial de \vec{H} .

$$\begin{aligned} \left(\vec{H}_i + \vec{H}_r - \vec{H}_t \right) \times \hat{j} &= 0 \\ B_{xi} + B_{xr} &= B_{xt} \end{aligned}$$

Sustituyendo (3.1)-(3.6) en (2.15), considerando la ley de Snell (3.8) y dadas las direcciones de la componente perpendicular a la superficie de \vec{k} como se muestra en la figura 3.2:

$$k_i^\perp E_{zi} - k_r^\perp E_{zr} = k_t^\perp E_{zt} \quad (3.10)$$

Donde \perp representa la componente perpendicular.

- Las otras dos condiciones de frontera no proporcionan información relevante alguna por tratarse de un medio no magnético.

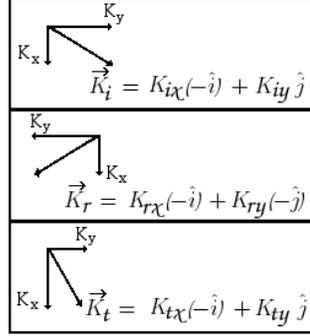


Figura 3.2: Componentes paralela y transversal de \vec{k} .

Las ecuaciones (3.9) y (3.10) forman un sistema de ecuaciones fácil de resolver conociendo E_{zi} . Para el coeficiente de reflexión de fresnel se tiene:

$$r = \frac{E_{zr}}{E_{zi}} = \frac{k_i^\perp - k_t^\perp}{k_i^\perp + k_t^\perp} \quad (3.11)$$

3.1.2. Polarización TM o P

Ahora se considera el mismo problema pero con polarización TM como se muestra en la figura 3.3. Escribiendo los campos asociados a cada una de estas ondas:

Incidente:

$$\vec{B}_i = B_{zi} \hat{z} e^{i(\vec{k}_i \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.12)$$

$$\vec{E}_i = \left(E_{xi} \hat{i} + E_{yi} \hat{j} \right) e^{i(\vec{k}_i \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.13)$$

Reflejado:

$$\vec{B}_r = B_{zr} \hat{z} e^{i(\vec{k}_r \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.14)$$

$$\vec{E}_r = \left(E_{xr} \hat{i} + E_{yr} \hat{j} \right) e^{i(\vec{k}_r \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.15)$$

Transmitido:

$$\vec{B}_t = B_{zt} \hat{z} e^{i(\vec{k}_t \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.16)$$

$$\vec{E}_t = \left(E_{xt} \hat{i} + E_{yt} \hat{j} \right) e^{i(\vec{k}_t \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad (3.17)$$

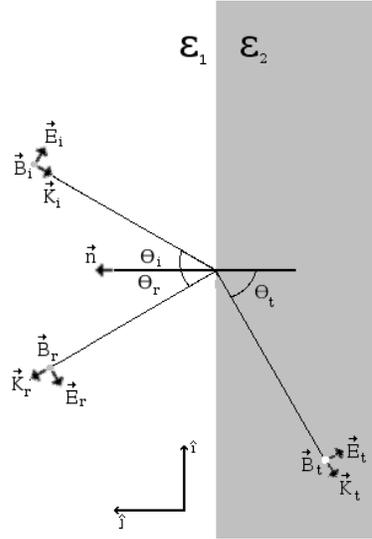


Figura 3.3: Reflexión y refracción de ondas electromagnéticas con polarización TM de la luz incidente. Donde: $\vec{k}_i, \vec{k}_r, \vec{k}_t$ es la dirección de propagación del campo incidente, reflejado y refractado respectivamente. La orientación de los campos $\vec{E}_i, \vec{E}_r, \vec{E}_t$ se escogen de forma que den un flujo positivo de energía en la dirección de propagación. El campo \vec{B} siempre esta en dirección \hat{z} .

Al aplicar las condiciones de frontera todos los campos deben de ser iguales en todo tiempo en $z=0$ y se obtiene la ley de Snell (3.8) de la misma forma.

1. De la continuidad de la componente tangencial de \vec{E} en $z=0$.

$$\left(\vec{E}_i + \vec{E}_r - \vec{E}_t \right) \times \hat{n} = 0 \quad (3.18)$$

De (2.15) se puede expresar:

$$\vec{E} = \frac{\omega \vec{B} \times \vec{k}}{k^2} + \cancel{\frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{k^2}} \vec{0} \quad (3.19)$$

Sustituyendo (3.19) en (3.18) y después $k = \frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon}$ y considerando la dirección de k_y como lo muestra la figura 3.2:

$$\frac{1}{\epsilon_1} (B_{iz}k_i^\perp - B_{rz}k_r^\perp) = \frac{1}{\epsilon_2} B_{rz}k_t^\perp \quad (3.20)$$

2. De la continuidad de la componente tangencial de \vec{H} :

$$\begin{aligned} (\vec{H}_t + \vec{H}_r - \vec{H}_t) \times \hat{j} &= 0 \\ (\vec{B}_t + \vec{B}_r - \vec{B}_t) \times \hat{j} &= 0 \end{aligned}$$

Pero dado que \vec{B} solo tiene componente en \hat{k} y que los campos deben de estar en fase en la interfaz a cualquier t:

$$B_{iz} + B_{rz} = B_{tz} \quad (3.21)$$

3. Las otras dos condiciones de frontera no proporcionan información relevante alguna.

Las ecuaciones (3.20) y (3.21) forman un sistema de ecuaciones fácil de resolver conociendo B_{zi} . Para el coeficiente de reflexión de fresnel se tiene:

$$r = \frac{B_{zr}}{B_{zi}} = \frac{\frac{k_z^\perp}{\epsilon_1} - \frac{k_t^\perp}{\epsilon_2}}{\frac{k_z^\perp}{\epsilon_1} + \frac{k_t^\perp}{\epsilon_2}} \quad (3.22)$$

3.2. Modos normales

La excitación de un modo normal de un sistema oscilatorio es el fenómeno que se produce al coincidir la frecuencia propia de éste con la frecuencia de una excitación externa. Los modos normales son también llamados frecuencias naturales o frecuencias resonantes. La característica principal de éstos es que una vez excitado el sistema en su modo, este seguirá oscilando aún después de que la excitación externa sea retirada.

Para identificar los modos normales de nuestro sistema formado por una interfaz $\epsilon_1 - \epsilon_2$ retomaremos las expresiones (3.9) y (3.10) para polarización S y (3.20) y (3.21) para polarización P. Que expresadas en forma matricial son:

Pol. S:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ k_t^\perp & k_r^\perp \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_t \\ E_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ k_i^\perp \end{pmatrix} E_i \quad (3.23)$$

Pol. P:

$$\begin{pmatrix} \frac{k_i^\perp}{\epsilon_2} & \frac{k_r^\perp}{\epsilon_1} \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_t \\ B_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_i^\perp}{\epsilon_1} \\ 1 \end{pmatrix} B_i \quad (3.24)$$

Para poder tener un modo normal es necesario que exista una solución para el sistema de ecuaciones (3.23) o bien para (3.24) en ausencia de B_{iz} o de E_{iz} y que dicha solución no sea trivial, para esto se requiere que el determinante correspondiente al sistema de ecuaciones sea cero. Observe que el determinante corresponde al denominador del coeficiente de reflexión de fresnel para cada uno de los casos.

Pol. S:

$$k_r^\perp + k_t^\perp = 0 \quad (3.25)$$

No es posible tener modos normales para polarización S si los materiales son no magnéticos ($\mu_{r1} = \mu_{r2} = 1$).

Pol. P:

$$\frac{k_r^\perp}{\epsilon_1} = -\frac{k_t^\perp}{\epsilon_2} \quad (3.26)$$

Solamente es posible excitar algún modo normal cuando las funciones dieléctricas de los medios tienen signos contrarios.

De la condición 3.26 para los modos normales de la interfaz surge la importancia de los metales, que como se verá en la sección 3.4, su función dieléctrica puede tomar valores negativos.

3.3. Campo evanescente

La solución de la ecuación (3.26) para una interfaz metal-dieléctrico son los plasmones de superficie y éstos pueden ser evanescentes a lo lejos de la interfaz (plasmón de superficie no radiativo) o pueden ser oscilatorios a lo lejos de la interfaz (plasmón de superficie radiativo). El plasmón de superficie de interés para este trabajo es el no radiativo.

Para obtener un comportamiento evanescente del campo a lo lejos de la interfaz es necesario exigir que la componente perpendicular de la dirección del vector de propagación del campo sea imaginaria, esto es por la forma en que definimos el campo.

$$\vec{\xi} = \vec{\xi}_0 e^{i(k^\perp x^\perp + k^\parallel x^\parallel - \omega t)}$$

Con $k^\perp = i|k^\perp|$:

$$\vec{\xi} = \underbrace{e^{-|k^\perp|x^\perp}}_{\text{Decaimiento}} \underbrace{\vec{\xi}_0 e^{i(k^\parallel x^\parallel - \omega t)}}_{\text{Oscilatorio}} \quad (3.27)$$

El campo descrito por (3.27) define un comportamiento evanescente a lo lejos de la interfaz y un comportamiento oscilatorio a lo largo de ésta.

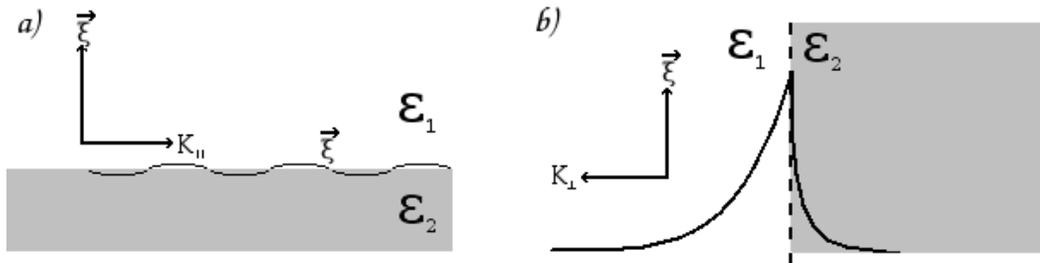


Figura 3.4: campo descrito por (3.27): a) Evanescente a lo lejos de la interfaz y b) oscilatorio a lo largo de ésta

3.4. Modelo de Drude de la función dieléctrica de un metal

El modelo de Drude se basa en la aplicación de la teoría cinética a los electrones en un sólido. Supone que el material contiene iones positivos inmóviles y que un “gas de electrones” clásicos, que no interactúan entre sí. Escribimos la ecuación de movimiento de un electrón de masa m , carga e y sujeto a un campo eléctrico \vec{E} y fuerza de amortiguamiento $m\gamma\vec{v}$:

$$\frac{d}{dt}(m\vec{v}) = -e\vec{E} - m\gamma\vec{v} \quad (3.28)$$

La densidad electrónica del metal es $\rho = ne$. Multiplicando por ρ y dividiendo por m :

$$\rho \frac{d}{dt}(\vec{v}) = -\frac{\rho e \vec{E}}{m} - \rho \gamma \vec{v} \quad (3.29)$$

Ahora, sustituyendo la densidad de corriente $\vec{J} = -ne\vec{v} = -\rho\vec{v}$:

$$-\frac{d}{dt}\vec{J} = -\omega_p^2 \epsilon_0 \vec{E} + \gamma \vec{J} \quad (3.30)$$

Donde $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$ es la frecuencia de plasma, la cual es una frecuencia de oscilación de los electrones alrededor de su punto de equilibrio. Para campos con la parte temporal de la forma $e^{-i\omega t}$, podemos escribir:

$$\frac{d}{dt}\vec{J} = -i\omega\vec{J} \quad (3.31)$$

Sustituyendo en la ecuación de movimiento 3.30:

$$\begin{aligned} (i\omega - \gamma)\vec{J} &= -\omega_p^2 \epsilon_0 \vec{E} \\ \vec{J} &= -\frac{\omega_p^2 \epsilon_0}{i\omega - \gamma} \vec{E} \\ \vec{J} &= \frac{i\omega_p^2 \epsilon_0}{\omega + i\gamma} \vec{E} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Comparando con la ley de Ohm, $\vec{J} = \sigma \vec{E}$, se observa que:

$$\sigma = \frac{i\omega_p^2 \epsilon_0}{\omega + i\gamma} \quad (3.33)$$

De las ecuaciones de Maxwell se puede definir la función dieléctrica (ver apéndice C para los detalles):

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma}{\omega \epsilon_0} \quad (3.34)$$

Sustituyendo (3.33) en (3.34) se obtiene al final:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} = 1 - \frac{\omega_p^2 \omega^2}{\omega^4 - \omega^2 \gamma^2} - i \frac{\omega_p^2 \omega \gamma}{\omega^4 - \omega^2 \gamma^2} \quad (3.35)$$

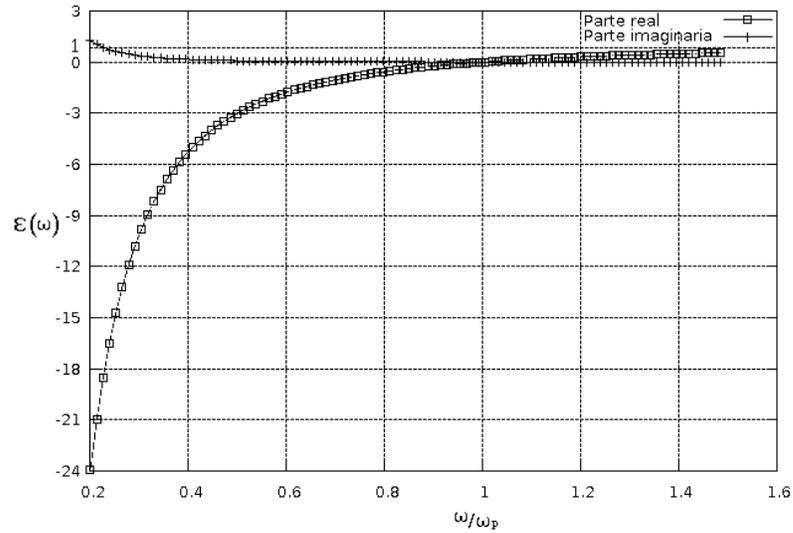


Figura 3.5: Función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ de Drude para la plata. Con frecuencia de plasma $\omega_p = 5.73 \times 10^{15} \text{ rad/s}$ y con amortiguamiento caracterizado por $\gamma = \omega_p/100$. + Parte imaginaria. □ Parte real.

3.5. Relación de dispersión del plasmón de superficie

En general el número de onda es:

$$\begin{aligned} k^2 &= \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \\ k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2 &= \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \end{aligned} \quad (3.36)$$

Despejando la componente perpendicular de k :

$$|k_{\perp}| = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon - k_{\parallel}^2} \quad (3.37)$$

Sustituyendo en (3.26):

$$\begin{aligned} \left(\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1 - k_{\parallel}^2} \right) / \epsilon_1 &= - \left(\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_2 - k_{\parallel}^2} \right) / \epsilon_2 \\ \left(\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1 - k_{\parallel}^2 \right) \epsilon_2 &= \left(\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_2 - k_{\parallel}^2 \right) \epsilon_1 \end{aligned} \quad (3.38)$$

Despejando k_{\parallel} :

$$k_{\parallel} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \quad (3.39)$$

Nos queda la relación de dispersión para los modos normales de una interfaz. Si suponemos $\epsilon_1 = 1$ (vacío) y $Real\{\epsilon_2\} = -|Real\{\epsilon(\omega)\}|$ (función dieléctrica de Drude (3.35)), entonces de (3.39) nos queda la relación de dispersión para modos normales de una interfaz vacío-metal:

$$k_{\parallel} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)}}{2 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)}}} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\omega(\omega+i\gamma) - \omega_p^2}{2\omega(\omega+i\gamma) - \omega_p^2}} \quad (3.40)$$

O bien si exigimos que el campo debe de ser evanescente en cada uno de los medios para obtener la relación de dispersión de un modo plasmón-polaritón no radiativo. Según la sección 3.3 y (3.37):

$$k_{\parallel}^2 > \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon \quad (3.41)$$

Ahora para restringir los valores que puede tomar k_{\parallel} , sustituimos la condición (3.41) en la ecuación (3.35) y después en (3.26) y simplificando:

$$k_{\parallel} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)} - 1}{\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)} - 2}} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\omega_p^2 - \omega(\omega+i\gamma)}{\omega_p^2 - 2\omega(\omega+i\gamma)}} \quad (3.42)$$

nos queda una expresión muy similar a (3.40) pero con la diferencia que k_{\perp} es puramente evanescente dada la condición (3.41). Entonces esta última expresión es lo que llamaremos la relación de dispersión de los modos normales que solo se propagan a lo largo de la interfaz vacío-metal, es decir a los plasmones de superficie. Ahora si tomamos el limite cuando $k_{\parallel} \rightarrow \infty$ de (3.42):

$$\lim_{k_{\parallel} \rightarrow \infty} = \left(\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)} - 2 \right) \rightarrow 0 \quad (3.43)$$

Si consideramos que $\gamma\omega \ll \omega_p$, entonces el limite (3.43) es:

$$\omega = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \quad (3.44)$$

Que como se muestra en la figura 3.6 solo la relación de dispersión (3.39) tiende asintóticamente a este valor. Esto no afecta la generalidad de nuestro estudio ya que nuestro interés está en los modos no radiativos. Resulta imperativo entonces mantener valores de ω menores a ω_p y valores pequeños de γ .

3.6. Excitación del plasmón de superficie

La principal complicación al tratar de excitar un plasmón de superficie con luz, como lo muestra (3.42), es que la relación de dispersión está al lado derecho de la línea de luz ($\frac{\omega}{c}$). Para un haz incidente dado, el número de onda debe de ser incrementado en un valor Δk_{\parallel} para acoplar los fotones con los plasmones. Para esto se usan comúnmente dos métodos:

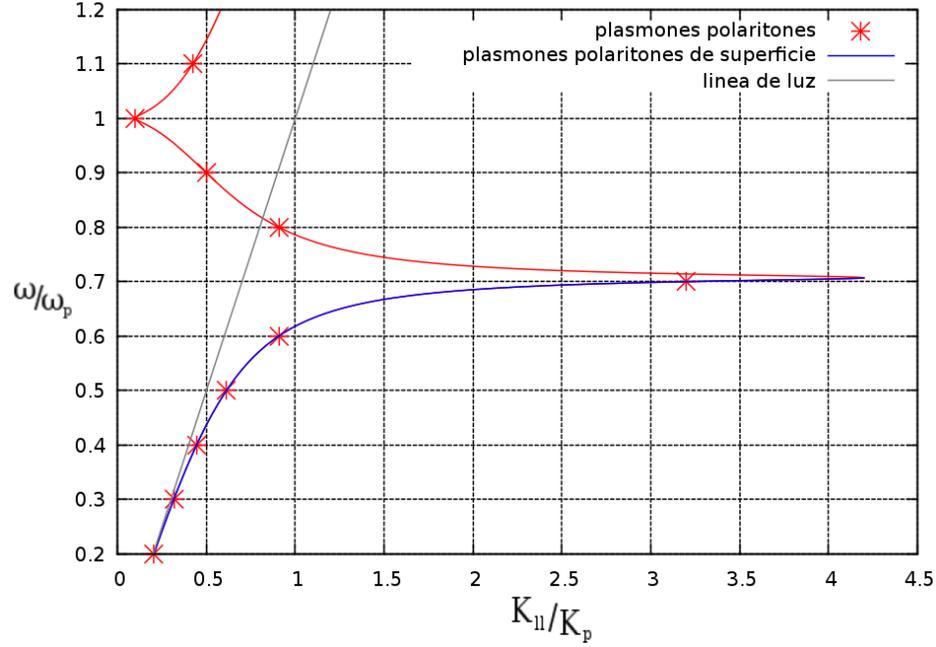


Figura 3.6: Relación de dispersión para modos normales de una interfaz Vacío-Metal. Relación de dispersión (3.40) \times y (3.42) \square . Con $\omega_p = 5.76 \times 10^{15} \text{rad/s}$ y $\gamma = \frac{\omega_p}{100}$ y $k_p = \frac{\omega_p}{c}$.

Acoplamiento por rejilla: Si luz ($k = \omega/c$) llega a una rejilla con una constante de rejilla a , a un ángulo θ_0 su componente de el vector de onda paralelo la superficie puede tomar valores

$$k_{\parallel}(\nu) = \frac{\omega}{c} \sin \theta_0 \pm \nu \frac{2\pi}{a} \quad \text{con } \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (3.45)$$

Entonces la relación (3.42) puede satisfacerse, como lo muestra la figura 3.7.

Acoplamiento por ATR: Si la luz es reflejada sobre la superficie de un metal cubierta con un medio dieléctrico ($\epsilon > 1$), por ejemplo con un medio cilindro de cuarzo, su número de onda se cambia de ω/c a $(\omega/c)\sqrt{\epsilon}$ y su proyección en la superficie es

$$k_{\parallel} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon} \sin \theta_0 \quad (3.46)$$

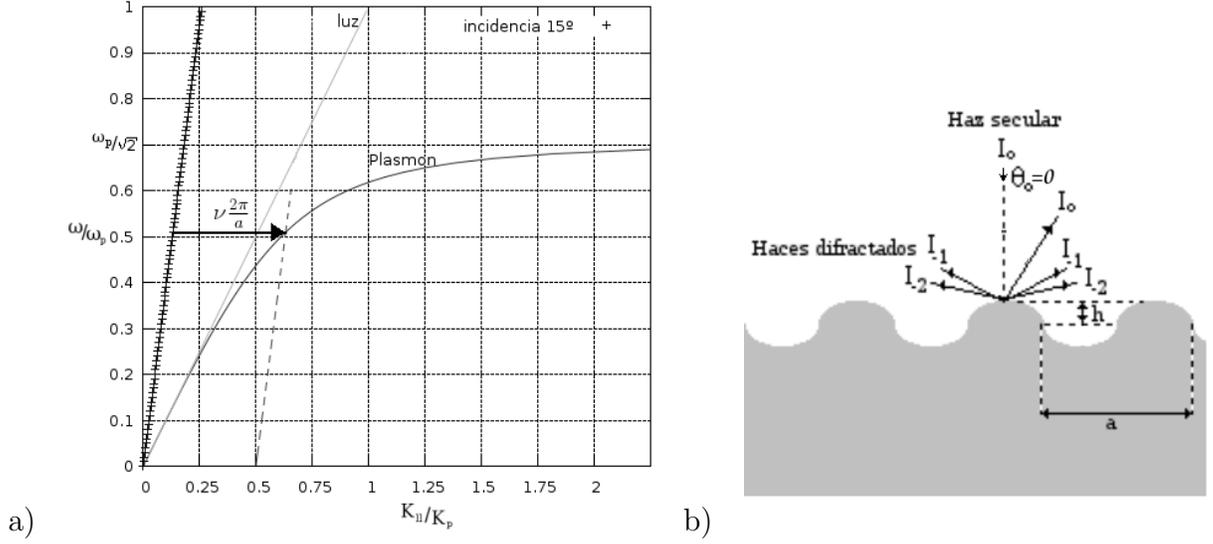


Figura 3.7: Acoplamiento por rejilla. a) Plasmón: Relación de dispersión para plasmones de superficie no radiativos, luz: línea de luz, + línea de luz incidente a 15° . b) Rejilla con periodo a y altura h .

entonces la relación de dispersión (3.42) puede ser cumplida entre la línea de luz en el vacío $\frac{\omega}{c}$ y la línea de luz en el medio $\frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon}$ como se muestra en la figura 3.8.

En ambos métodos se transforma luz de ser radiativa a ser evanescente. En este trabajo haremos uso de la definición del campo evanescente según (3.27) para generar un plasmón de superficie. Considerando las dirección del medio como en la figura 3.3, el campo evanescente incidente es de la forma:

$$B_z = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma_x}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2} \sin(k_{||}x - \omega t) \quad (3.47)$$

Donde σ_x representa el ancho representativo del perfil gaussiano que tiene la fuente, x_0 es la distancia a la cual el campo tiene su valor máximo; y de forma similar, σ_t es el ancho representativo del perfil temporal que tiene la fuente, t_0 es el tiempo al cual el campo tiene su valor máximo; y para los argumentos del seno, $k_{||}$ es el valor central que deseamos que tenga la fuente evanescente y ω el valor central para la frecuencia de forma que se pueden definir, a través de la transformada de Fourier, un ancho en

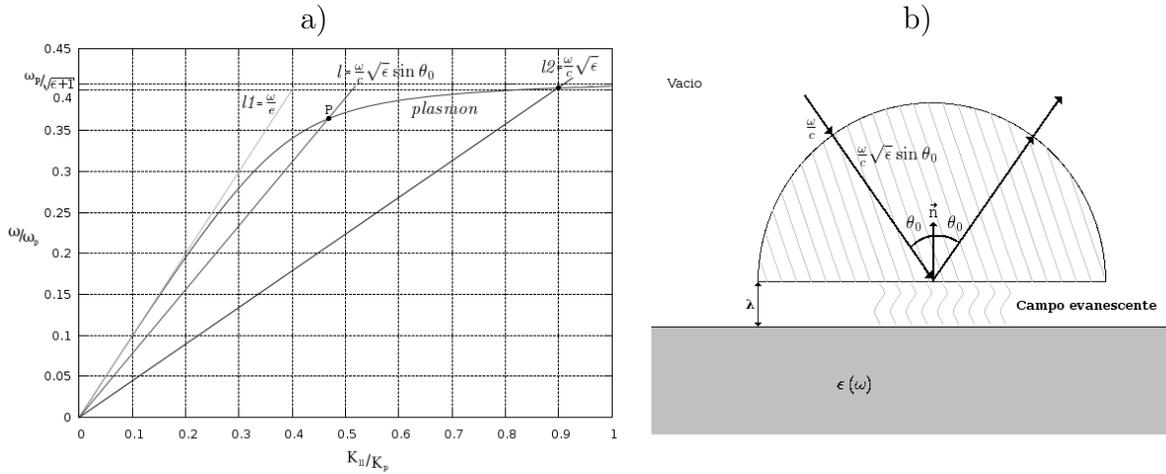


Figura 3.8: Acoplamiento por ATR configuración Otto. a) *Plasmón*: Relación de dispersión para plasmones de superficie no radiativos de una interfaz dieléctrico-metal ($\epsilon - \epsilon(\omega)$) con $\epsilon = 5$, $l1$: línea de luz en el vacío, $l2$: línea de luz en el medio dieléctrico ϵ , l : línea de luz a θ_0 grados de incidencia, P: Cruce de l y *Plasmón* donde se genera el plasmón de superficie. b) Configuración más usada del ATR (Otto)

frecuencia y en $k_{||}$ según:

$$\sigma_x = \frac{1}{\sigma_{k_{||}}} \quad y \quad \sigma_t = \frac{1}{\sigma_f 2\pi} \tag{3.48}$$

Ver apéndice D para los detalles. La diferencia entre las relaciones es debido a que k es la frecuencia angular espacial análoga a ω .

Capítulo 4

Método de diferencias finitas en el dominio temporal

El método de diferencias finitas en el dominio temporal, o FDTD; es uno de los métodos computacionales más populares por su simplicidad, alta eficiencia y su fácil adaptabilidad a diversos problemas. Algunas de sus cualidades más importantes son:

- Predicciones de respuesta en banda ancha.
- Permite modelos geométricos arbitrarios.
- Interacción con objetos con cualquier conductividad desde metales perfectos, o hasta metales con absorción.
- Permite parámetros constitutivos para modelar los materiales especiales, tales como dieléctricos con pérdidas, plasma anisotrópico, etc.
- Permite cualquier tipo de respuesta, incluyendo campos lejanos derivados de campos cercanos, como por ejemplo: Campos difractados, patrones de antenas, respuestas superficiales, etc.

El corazón del FDTD, aplicado al electromagnetismo, son las rotacionales de las ecuaciones de Maxwell en su forma diferencial en el dominio temporal. Estas expresiones

se reescriben en términos de derivadas centrales finitas para después ser evaluadas espacialmente durante un determinado número de pasos temporales.

4.1. Algo de historia

La forma básica de discretizar el espacio y el avance temporal por pasos nos lleva hasta 1966 con una publicación seminal de Kane Yee [16]. Y el nombre del método y su acrónimo es original del Allen Taflove que lo publicó en 1980 [17].

Inicialmente había poco interés en el FDTD posiblemente debido a la falta del poder de cómputo que exige este método. Sin embargo, con el advenimiento de los bajos costos, computadoras cada vez más poderosas y la misma mejora del método, la técnica del FDTD se ha convertido en uno de los algoritmos de cómputo más populares para resolver problemas del electromagnetismo.

4.2. Expresiones básicas del FDTD

La ecuación (2.14) representa la propagación de ondas electromagnéticas a través de medios descritos por ϵ y μ y, como se vio en la sección 2.2, es una consecuencia de las ecuaciones de Maxwell. Sin embargo, cuando se resuelve un problema del electromagnetismo, especialmente con algún método numérico, resulta más conveniente resolver las ecuaciones de Maxwell. Para esto tomamos la ecuación (2.9) con $\vec{J} = 0$ donde se observa la una ecuación representada en término de los rotacionales de las ecuaciones de Maxwell.

Con fines de simplificar el traslado de las ecuaciones de Maxwell a los métodos numéricos se hace uso de unidades Gaussianas, para esto se normalizó el campo al

hacer:

$$\tilde{E} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \vec{E} \quad (4.1)$$

$$\tilde{D} = \sqrt{\frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}} \vec{D} \quad (4.2)$$

De esta forma el campo \vec{E} y el \vec{H} tienen el mismo orden de magnitud. Reescribiendo los rotacionales de (2.9) en función de ω :

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{D} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \nabla \times \vec{H} \quad (4.3)$$

$$\text{Donde : } \tilde{D} = \epsilon_r^*(\omega) \cdot \tilde{E}(\omega) \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{H} = -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \nabla \times \tilde{E} \quad (4.5)$$

Considerando la polarización TM definida en la sección 3.1.2 las ecuaciones se reducen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{D} = c \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & H_z \end{vmatrix} = c \left(\frac{\partial}{\partial y} H_z \hat{i} - \frac{\partial}{\partial x} H_z \hat{j} \right) \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{H} = -c \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & 0 \end{vmatrix} = -c \left[-\frac{\partial}{\partial z} E_y \hat{i} + \frac{\partial}{\partial z} E_x \hat{j} + \left(\frac{\partial}{\partial x} E_y - \frac{\partial}{\partial y} E_x \right) \hat{k} \right] \quad (4.7)$$

Y comparando componente a componente del lado izquierdo al derecho se reduce de nuevo:

$$\frac{\partial}{\partial t} D_x = c \frac{\partial}{\partial y} H_z \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} D_y = -c \frac{\partial}{\partial x} H_z \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_z = c \frac{\partial}{\partial y} E_x - c \frac{\partial}{\partial x} E_y \quad (4.10)$$

Para lograr una formulación discreta, aproximamos las derivadas espaciales y temporales por su representación en diferencias finitas. Recordando la definición de derivada en diferencias centrales:

$$\frac{d}{d\alpha} f(\alpha) = \lim_{\Delta\alpha \rightarrow 0} \frac{f\left(\alpha + \frac{\Delta\alpha}{2}\right) - f\left(\alpha - \frac{\Delta\alpha}{2}\right)}{\Delta\alpha} \quad (4.11)$$

Como se observa en (4.11) necesitamos dos puntos contiguos para evaluar una derivada en forma discreta ($\Delta\alpha = cte$) tanto para las derivadas espaciales como las temporales. Para cumplir con este requisito tomaremos la definición de *celda de Yee*, propuesta por primera vez por Kane Yee en 1966 [16], que define un intercalado espacial y temporal de las componentes de los campos. La figura 4.1 muestra nuestra celda de Yee, donde los índices enteros i y j corresponden a la partición espacial ($x = i\Delta_s$ y $y = j\Delta_s$) y la n a la partición temporal ($t = n\Delta_t$), el intercalado de los campos consiste en que las componentes del campo \vec{H} coincide con índices enteros espaciales de la partición pero con índices parciales de la partición del tiempo y las componentes del campo \vec{E} coincide con índices parciales del espacio pero índices enteros del tiempo.

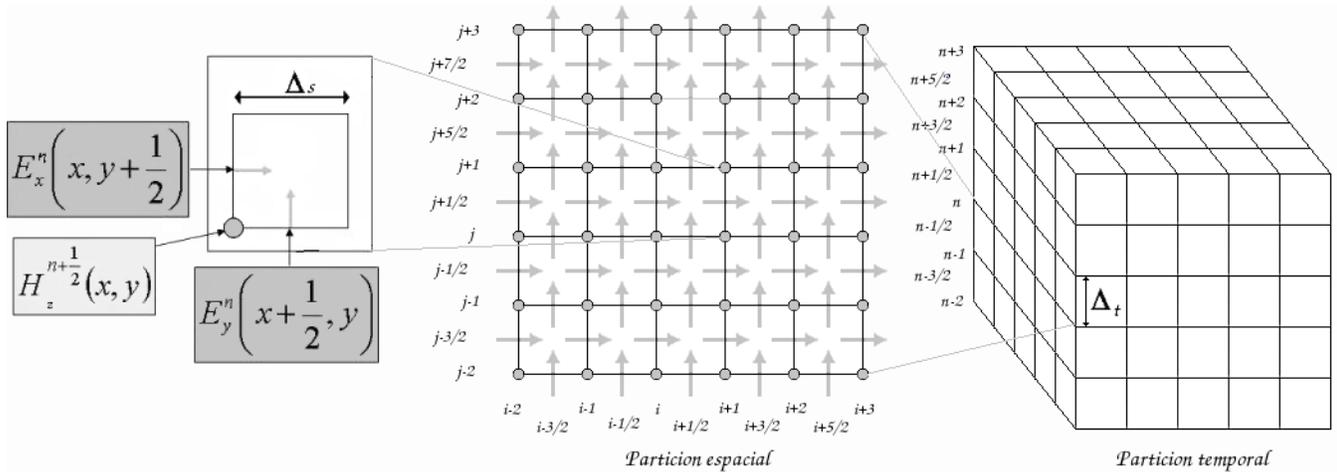


Figura 4.1: Celda de Yee. Intercalado espacial y temporal de las componentes de los campos, donde $x = i\Delta_s, y = j\Delta_x$ y $t = n\Delta_t$

Sustituyendo (4.8)-(4.10) en (4.11) y considerando el intercalado definido en la celda de Yee (figura 4.1) las diferencias finitas de los campos quedan:

$$D_x^{n+1} \left(i, j + \frac{1}{2} \right) = D_x^n \left(i, j + \frac{1}{2} \right) + \frac{c\Delta_t}{\Delta_s} \left[H_z^{n+\frac{1}{2}} (i, j + 1) - H_z^{n+\frac{1}{2}} (i, j) \right] \quad (4.12)$$

$$D_y^{n+1} \left(i + \frac{1}{2}, j \right) = D_y^n \left(i + \frac{1}{2}, j \right) + \frac{c\Delta_t}{\Delta_s} \left[H_z^{n+\frac{1}{2}} (i + 1, j) - H_z^{n+\frac{1}{2}} (i, j) \right] \quad (4.13)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}} (i, j) = H_z^{n-\frac{1}{2}} (i, j) + \frac{c\Delta_t}{\Delta_s} \left[E_y^n \left(i + \frac{1}{2}, j \right) - E_y^n \left(i - \frac{1}{2}, j \right) - E_x^n \left(i, j + \frac{1}{2} \right) + E_x^n \left(i, j - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (4.14)$$

4.3. Estabilidad

Una onda electromagnética que se propaga en el vacío no puede ir más rápido que la velocidad de la luz. Así que es necesario determinar el paso temporal teniendo en mente esta restricción. Pensando en la celda de Yee, para propagarse una unidad espacial en dirección paralela a los ejes se requiere un mínimo de tiempo $\Delta_t = \Delta_s/c$. Pero cuando se piensa en 2D es posible considerar la propagación en diagonal, lo cual nos deja con $\Delta_t = \Delta_s/(\sqrt{2}c)$ y para 3D $\Delta_t = \Delta_s/(\sqrt{3}c)$. Esto se generaliza con la *Condición de Courant*:

$$\Delta_t \leq \frac{\Delta_s}{\sqrt{nc}} \quad (4.15)$$

Donde n es la dimensión de la simulación. En este trabajo usaremos Δ_t :

$$\Delta_t = \frac{\Delta_s}{2c} \quad (4.16)$$

La cual nos permite reducir el término $\frac{c\Delta_t}{\Delta_s}$ de las ecuaciones (4.12)-(4.14) a una constante:

$$\frac{c\Delta_t}{\Delta_s} = 0.5 \quad (4.17)$$

4.4. Capa de acoplamiento perfecto (PML)

El tamaño del área que puede ser simulada por el FDTD esta limitada por los recursos de cómputo y por esto es necesario definir algún mecanismo por el cual sea posible que el campo que se dirige fuera de nuestra ventana de simulación no se refleje de vuelta al espacio del problema. Las capas de acoplamiento perfecto, o mejor conocidas por sus siglas en inglés *PML's*, son capas que absorben artificialmente la intensidad de campo que se dirige hacia afuera con el fin de que éstas, una vez que están dentro de las *PML's*, prácticamente desaparezcan de la simulación.

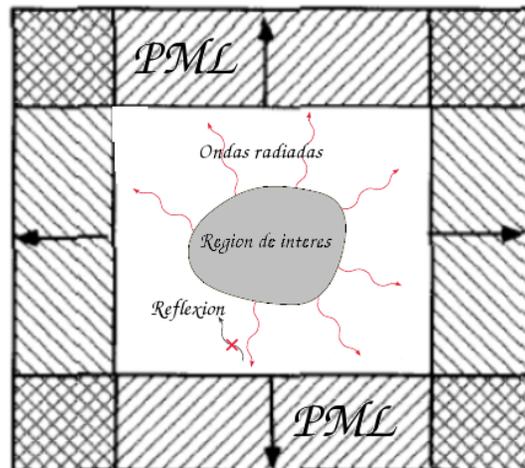


Figura 4.2: Problema típico donde se muestra como se trunca la región de interés con las PMLs

La idea básica de este método se basa en el hecho de que una onda que se propaga en un medio (A) al encontrarse con una interfaz hacia otro medio (B) ésta ve un cambio de impedancia y refleja una porción de sí de acuerdo con:

$$\Gamma = \frac{\eta_A - \eta_B}{\eta_A + \eta_B} \quad \text{con} \quad \eta = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}} \quad (4.18)$$

De manera que si μ cambia con ϵ de manera que η se mantenga constante, se puede tener $\Gamma = 0$ y no ocurriría reflexión. Sin embargo esto no resuelve nuestro problema,

porque el campo seguiría propagándose en el medio. Lo que realmente se quiere es que además el medio disipe energía de forma que la onda en él se pierda antes de llegar al borde de la ventana de simulación. Esto se logra haciendo que μ y ϵ sean complejos, ya que la parte imaginaria es la que ocasiona el decaimiento. Es importante señalar que los campos normalizados (4.1) no contienen a ϵ ni a μ y que la señalada constante dieléctrica y permitividad son ficticias ($\epsilon_{Fx}^*, \epsilon_{Fy}^*$ y μ_{Fz}^*).

En el libro *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method* [10], sección 3.2, se detalla el desarrollo para formular las PMLs. Al final las expresiones básicas del FDTD 4.12-4.14, considerando (4.17), se modifican a:

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j) = g_{i3}(i) g_{j3}(j) H_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j) - 0.5g_{i2}(i) g_{j2}(j) [E_y^n(i + \frac{1}{2}, j) - E_y^n(i - \frac{1}{2}, j) - E_x^n(i, j + \frac{1}{2}) + E_x^n(i, j - \frac{1}{2})] \quad (4.19)$$

$$D_x^{n+1}(i, j + \frac{1}{2}) = f_{j3}(j + \frac{1}{2}) D_x^n(i, j + \frac{1}{2}) + 0.5f_{j2}(j + \frac{1}{2}) [H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j + 1) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j)] + f_{i1}(i) I_{hx}^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) \quad (4.20)$$

$$D_y^{n+1}(i + \frac{1}{2}, j) = f_{i3}(i + \frac{1}{2}) D_y^n(i + \frac{1}{2}, j) - 0.5f_{i2}(i + \frac{1}{2}) [H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + 1, j) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j)] - f_{j1} I_{hy}^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) \quad (4.21)$$

Donde las variables g 's y las f 's son los parámetros de las PMLs y las I_h 's son integrales que representa la parte absorbente de las PML's, las cuales se asemeja a la de un dieléctrico absorbente (sección 4.5.1). Estas últimas en su forma discreta son:

$$I_{hx}^{n+\frac{1}{2}} = I_{hx}^{n+\frac{1}{2}} + [H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j + 1) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j)]$$

$$I_{hy}^{n+\frac{1}{2}} = I_{hy}^{n+\frac{1}{2}} + [H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + 1, j) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j)]$$

La variación de los parámetros se establece de forma empírica como una relación cúbica del parámetro auxiliar $x_n = \frac{\sigma(i)\Delta t}{2\epsilon_0}$ el cual se incrementa al entrar en las PMLs en la dirección en la que entran las ondas radiadas, tal y como se muestra en la figura 4.2.

Por ejemplo, para la dirección en x tendríamos:

$$\begin{aligned}
 x_n(i) &= 0.333 \left(\frac{i}{\text{Numero de PMLs}} \right)^3 \quad \text{con } i = 1, 2, \dots, \text{Numero de PMLs} \\
 f_{i1}(i) &= x_n(i) \\
 g_{i2}(i) &= \frac{1}{1+x_n(i)} \\
 g_{i3}(i) &= \frac{1-x_n(i)}{1-x_n(i)}
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

Lo mismo aplica para la dirección en y hacia las PML's pero para las f_j 's y las g_j 's. Fuera de las PMLs los parámetros f_{1i} y f_{1j} valen cero y los demás valen 1.

4.5. Formulación con diferentes medios

Como tenemos la premisa de tener medios no magnéticos todo el material, ya sea dieléctrico o metal, esta representado por la función dieléctrica $\epsilon(\omega)$. Hasta el momento la formulación de los campos para el FDTD, expresiones (4.19)-(4.21), solo establecen la relación entre los campos \tilde{D} con \vec{H} y \vec{H} con \tilde{D} ; Esto es porque no hemos hablado de la forma en que se simulan los medios materiales en el FDTD. Para esto nos centraremos en la ecuación (4.4):

$$\tilde{D} = \epsilon_r^*(\omega) \cdot \tilde{E}(\omega) \tag{4.23}$$

La cual es necesario trasladar al dominio del tiempo a través de la transformada de Fourier.

4.5.1. Dieléctrico con pérdidas

Consideremos un medio dieléctrico de la forma:

$$\epsilon_r^*(\omega) = \epsilon_r + \frac{\sigma}{i\omega\epsilon_0} \tag{4.24}$$

Sustituyendo (4.24) en (4.23)

$$\tilde{D}(\omega) = \epsilon_r \tilde{E}(\omega) + \frac{\sigma}{i\omega\epsilon_0} \tilde{E}(\omega) \tag{4.25}$$

El primer término del lado derecho no es ningún problema, que solo es un escalar multiplicando la transformada de \tilde{E} . Para el segundo término, la teoría de la transformada de Fourier (ver apéndice D.1) nos dice que el término $\frac{1}{i\omega}$ en el dominio de la frecuencia es una integración en el dominio del tiempo. Entonces (4.25) en el dominio del tiempo es:

$$\tilde{D}(t) = \epsilon_r \tilde{E}(t) + \frac{\sigma}{\epsilon_0} \int_0^t \tilde{E}(t') \cdot dt' \quad (4.26)$$

y esto a la vez muestreado temporalmente es:

$$\tilde{D}^n = \epsilon_r \tilde{E}^n + \frac{\sigma \Delta_t}{\epsilon_0} \sum_{i=0}^n \tilde{E}^i \quad (4.27)$$

Y si despejamos el \tilde{E}^n término:

$$\tilde{E}^n = \frac{\tilde{D}^n - \frac{\sigma \Delta_t}{\epsilon_0} \sum_{i=0}^{n-1} \tilde{E}^i}{\epsilon_r + \frac{\sigma \Delta_t}{\epsilon_0}} \quad (4.28)$$

Con esta expresión se calcula el campo \tilde{E} al enésimo paso temporal a partir del enésimo valor de \tilde{D} y los valores anteriores de \tilde{E} . Resulta conveniente reescribir (4.28):

$$\begin{aligned} \tilde{E}^n &= g_a \left(\tilde{D}^n - I^{n-1} \right) \\ \text{con } I^{n-1} &= g_b \sum_{i=0}^{n-1} \tilde{E}^i \\ g_b &= \frac{\sigma \Delta_t}{\epsilon_0} \\ g_a &= \frac{1}{\epsilon_r + \frac{\sigma \Delta_t}{\epsilon_0}} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Lo cual se aplica a ambas componentes del campo \tilde{E} que en término de las expresiones para FDTD quedan:

$$\begin{aligned} E_x^{n+1} \left(i, j + \frac{1}{2} \right) &= g_a(i, j) \left[D_x^n \left(i, j + \frac{1}{2} \right) - I_x^n(i, j) \right] \\ E_y^{n+1} \left(i + \frac{1}{2}, j \right) &= g_a(i, j) \left[D_y^n \left(i + \frac{1}{2}, j \right) - I_y^n(i, j) \right] \\ \text{con :} & \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} I_x^n(i, j) &= I_x^n(i, j) + g_b(i, j) E_x \left(i, j + \frac{1}{2} \right) \\ I_y^n(i, j) &= I_y^n(i, j) + g_b(i, j) E_y \left(i + \frac{1}{2}, j \right) \end{aligned}$$

Donde variables g_a y g_b son matrices con valores constantes que nos definen el medio. Para el vacío $g_a = 1$ y $g_b = 0$, lo cual nos reduce la ecuación (4.23) a $\tilde{E} = \tilde{D}$.

4.5.2. Metal con pérdidas

Ahora consideraremos un metal con pérdidas modelado con la función dieléctrica de Drude (3.35):

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{i\omega\gamma} + \frac{\omega_p^2}{i\gamma(\omega + i\gamma)} \quad (4.31)$$

Que sustituyendo en (4.23) y aplicando la transformada de Fourier, ver apéndice D.4, nos queda:

$$\tilde{D}(t) = \tilde{E}(t) + \frac{\omega_p^2}{\gamma} \int_0^\tau \tilde{E}(t') dt' - 2\pi \frac{\omega_p^2}{\gamma} \int_0^\tau e^{-\gamma(\tau-t')} \tilde{E}(t') dt' [18] \quad (4.32)$$

Donde, convenientemente, podemos reescribir las integrales como una sumatoria discreta:

$$\begin{aligned} I^n &= \frac{\omega_p^2}{\gamma} \sum_{i=0}^n \tilde{E}^i \Delta_t \\ S^n &= -2\pi \frac{\omega_p^2}{\gamma} \sum_{i=0}^n e^{-\gamma\Delta_t(n-i)} \tilde{E}^i \Delta_t \end{aligned} \quad (4.33)$$

Donde tenemos que factorizar el enésimo término de cada sumatoria de forma que:

$$\begin{aligned} I^n &= \frac{\omega_p^2 \Delta_t}{\gamma} \tilde{E}^n + I^{n-1} \\ S^n &= -2\pi \frac{\omega_p^2 \Delta_t}{\gamma} \tilde{E}^n - S^{n-1} \end{aligned} \quad (4.34)$$

Donde :

$$\begin{aligned} I^{n-1} &= \frac{\omega_p^2 \Delta_t}{\gamma} \sum_{i=0}^{n-1} \tilde{E}^i \\ S^{n-1} &= 2\pi \frac{\omega_p^2 \Delta_t}{\gamma} e^{-\gamma\Delta_t n} \sum_{i=0}^{n-1} e^{-\gamma\Delta_t i} \tilde{E}^i \end{aligned}$$

Sustituyendo ahora (4.34) en (4.33) y después en (4.32) y despejando E^n nos queda simplemente que

$$E^n = D^n - I^{n-1} + S^{n-1} \quad (4.35)$$

y si reescribimos esto último como las expresiones discretas del FDTD:

$$\begin{aligned}
 E_x^n(i, j + \frac{1}{2}) &= D_x^n(i, j + \frac{1}{2}) - I_x(i, j) + \text{dexp}S_x(i, j) \\
 I_x(i, j) &= I_x(i, j) + g_b(i, j) E_x(i, j + \frac{1}{2}) \\
 S_x(i, j) &= \text{dexp}S_x(i, j) - g_b(i, j) E_x(i, j + \frac{1}{2})
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

$$\text{Donde : } \text{dexp} = e^{-\gamma\Delta t}$$

$$g_b = 2\pi \frac{\omega_p^2 \Delta t}{\gamma}$$

Lo cual se repite exactamente igual para la componente E_y del campo. Es importante señalar que el orden de las expresiones es imperativo para preservar la convolución en el tiempo de la integral discreta S^{n-1}

4.6. Fuentes

4.6.1. Fuente suave y dura

Una fuente se crea simplemente asignando una función temporal deseada a una componente del campo eléctrico o magnético dentro de la cuadrícula que forma nuestro espacio de simulación. Por ejemplo, para una simulación con polarización TE en 1D, la siguiente fuente

$$E_s = \sin(2\pi f_0 n \Delta t) \tag{4.37}$$

se establece en la posición discreta i_s para generar una fuente sinusoidal continua de frecuencia f_0 :

$$E_z(i_s) = E_s \tag{4.38}$$

O bien de esta otra forma:

$$E_z(i_s) = E_z(i_s) + E_s \tag{4.39}$$

Al especificar la fuente de la forma 4.38 el campo es enteramente especificado en el punto i_s sin considerar ninguna otra fuente de campo, de aquí que se le conoce como

fuente dura (*hard source*). Este tipo de fuente causa una reflexión espuria y no física del campo que *choca* con el punto i_s .

Cuando la fuente es como 4.39 se dice que es una fuente suave (*soft source*), ya que considera otras fuentes de campo. Para mostrar la diferencia entre las fuentes duras y suaves consideremos una fuente de la forma:

$$E_p = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2} \quad (4.40)$$

Es decir, un pulso gaussiano con media t_0 y desviación estándar σ_t . O bien se puede decir que está centrado al tiempo t_0 y tiene un ancho total a la mitad del máximo (ATMM) de $2\sigma_t$ como se muestra en la figura 4.3. Si hacemos incidir dicho pulso sobre una interfaz

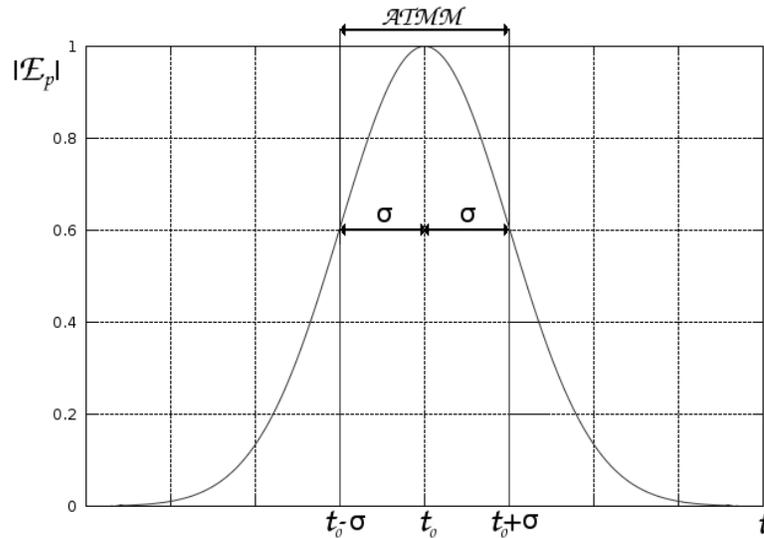


Figura 4.3: Fuente Gaussiana en 1D centrada en $t = t_0$ y con un ancho total a la mitad del máximo (ATMM) de $2\sigma_t$

vacío-dieléctrico, se esperaría que hubiese una parte reflejada y una transmitida. Sin embargo, esto puede variar un poco dependiendo de si usamos una fuente dura o una suave o si dejamos evolucionar lo suficiente la simulación hasta que el campo reflejado alcance el punto original de la fuente dura. La figura 4.4 y 4.5 muestran la evolución

temporal de una fuente dura (4.38) y una suave (4.39) respectivamente. La fuente se origina en $i_s = 250\Delta_x$ al tiempo $t = 0$, después a $t = 4000\Delta_t$ se observa que una parte es transmitida por el medio dieléctrico y una parte es reflejada, y a $t = 5100\Delta_t$ se observa que para la fuente dura 4.4 hay una segunda reflexión en el origen de la fuente que a diferencia de la fuente suave 4.5 no ocurre. La única ventaja aparente de la fuente

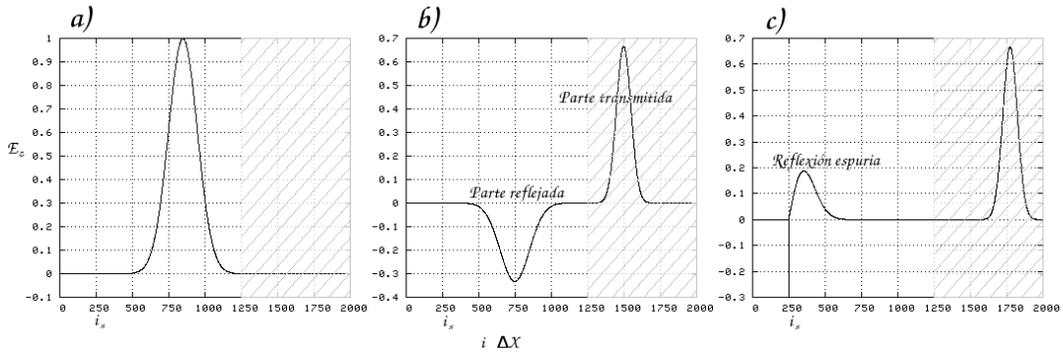


Figura 4.4: Fuente dura con forma de pulso gaussiano que inicia en $i = 250\Delta_x$ y que chocando con un dieléctrico en $i = 1250\Delta_x$: a) a $t = 2200\Delta_t$ b) a $t = 4000\Delta_t$ se observa que una parte es transmitida y otra es reflejada c) a $t = 5100\Delta_t$ se observa como la parte reflejada interactúa con el origen de la fuente dura: reflexión espuria

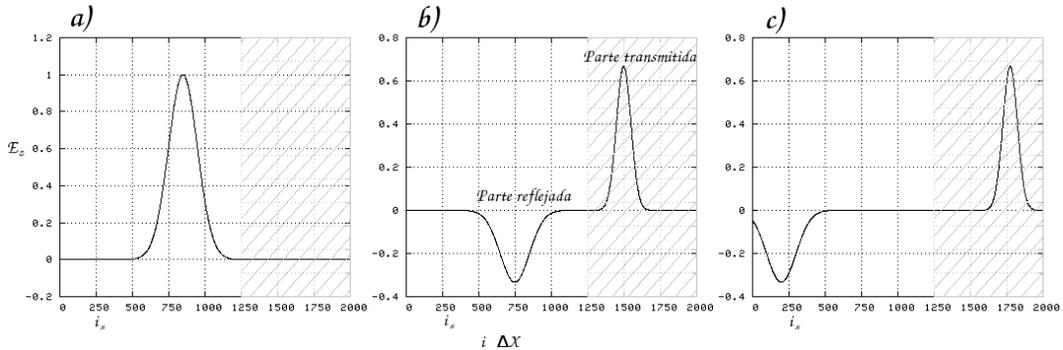


Figura 4.5: Fuente suave con forma de pulso gaussiano que inicia en $i = 250\Delta_x$ y que chocando con un dieléctrico en $i = 1250\Delta_x$: a) a $t = 2200\Delta_t$ b) a $t = 4000\Delta_t$ se observa que una parte es transmitida y otra es reflejada c) a $t = 5100\Delta_t$ se observa que el origen de la fuente no interactúa con el campo reflejado

dura sobre la suave es que esta no permite el movimiento de energía reflejada a través

del origen de la fuente hacia atrás, haciendo así las veces de una barrera de metal. De aquí en adelante nos referiremos a las fuentes suaves únicamente como fuentes, ya que es el único tipo de fuente que usaremos.

4.6.2. Paquete gaussiano

Un tipo de fuente muy importante en el FDTD es de la forma (4.40) porque nos permite tener la respuesta en un amplio espectro en frecuencia. Esto es dado a las propiedades de la transformada de Fourier que nos dice que a un pulso infinitamente pequeño en el tiempo corresponde un pulso infinitamente ancho en la frecuencia o bien que el producto de ambos espectros debe de mantenerse constante, según el apéndice D.2 (D.22):

$$\delta_t \delta_f = \frac{1}{2\pi} \quad (4.41)$$

Dado que la transformada de Fourier por definición es una operación compleja es necesario calcular su amplitud para facilitar el análisis.

La amplitud de la transformada de Fourier de un pulso gaussiano de la forma (4.40) resulta ser un pulso gaussiano centrado en el origen, ver apéndice D.21 para los detalles. Así, pues, es necesario de algún mecanismo que asegure que un pulso gaussiano (4.40) contenga las componentes en frecuencia de interés. La manera más sencilla de lograr esto sin comprometer la capacidad de cómputo disponible es apoyándonos en la propiedad de la transformada de Fourier de la modulación (D.5):

$$\mathfrak{F} \{ \sin(2\pi f_0 t) g(t) \} = \frac{1}{2i} G(f - f_0) - \frac{1}{2i} G(f + f_0)$$

Donde asumiremos que $g(t)$ es de la forma (4.40), de forma que el argumento de la transformada de Fourier es una función con forma de paquete gaussiano:

$$f(t) = \sin(2\pi f_0 t) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{t-t_0}{\sigma_t} \right)^2} \quad (4.42)$$

La cual tiene una transformada de Fourier:

$$F(f) = \frac{\sigma_t \sqrt{2\pi}}{2i} e^{-2\pi[\pi\sigma_t^2(f-f_0)^2+ift_0]} - \frac{\sigma_t \sqrt{2\pi}}{2i} e^{-2\pi[\pi\sigma_t^2(f+f_0)^2+ift_0]}$$

Y cuya amplitud es:

$$|F(f)| = \sigma_t \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left\{ \left[e^{-2\pi^2\sigma_t^2(f-f_0)^2} \right]^2 + \left[e^{-2\pi^2\sigma_t^2(f+f_0)^2} \right]^2 - 2 \left[e^{-4\pi^2\sigma_t^2(f^2+f_0^2)} \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (4.43)$$

Ver el apéndice D.3 para los detalles.

Se observa que los exponenciales de esta última expresión son gaussianas centradas en $+f_0$, $-f_0$ y 0 respectivamente y que el último está acompañado por un término que decae rápidamente para valores grandes de f_0 . Considerando esto, es posible simplificar la expresión (4.43):

$$\begin{aligned} |F(f)| &= \sigma_t \sqrt{\frac{\pi}{2}} \{ |F_1(f)| + |F_2(f)| \} \\ \text{con } |F_1(f)| &= e^{-2\pi^2\sigma_t^2(f-f_0)^2} \\ |F_2(f)| &= e^{-2\pi^2\sigma_t^2(f+f_0)^2} \end{aligned} \quad (4.44)$$

Para lograr esto, se evalúa la función (4.43) con un valor fijo arbitrario de σ_f y se hace

$$f_0 = \alpha\sigma_f \quad (4.45)$$

de manera que se busca un valor α que separe lo suficiente los pulsos gaussianos que forman (4.43) como para considerar (4.44). En la figura 4.6 se muestran las amplitudes normalizadas de la transformada de Fourier para un paquete gaussiano con diferentes valores de α , donde: $|F|$ es (D.31), $|F_1|$ y $|F_2|$ son como están definidas en (4.44) y $|F_3|$ es:

$$|F_3(f)| = \sigma_t \sqrt{\pi} e^{-4\pi^2\sigma_t^2(f^2+f_0^2)} \quad (4.46)$$

Se observa que para

$$f_0 > 3\sigma_f \quad (4.47)$$

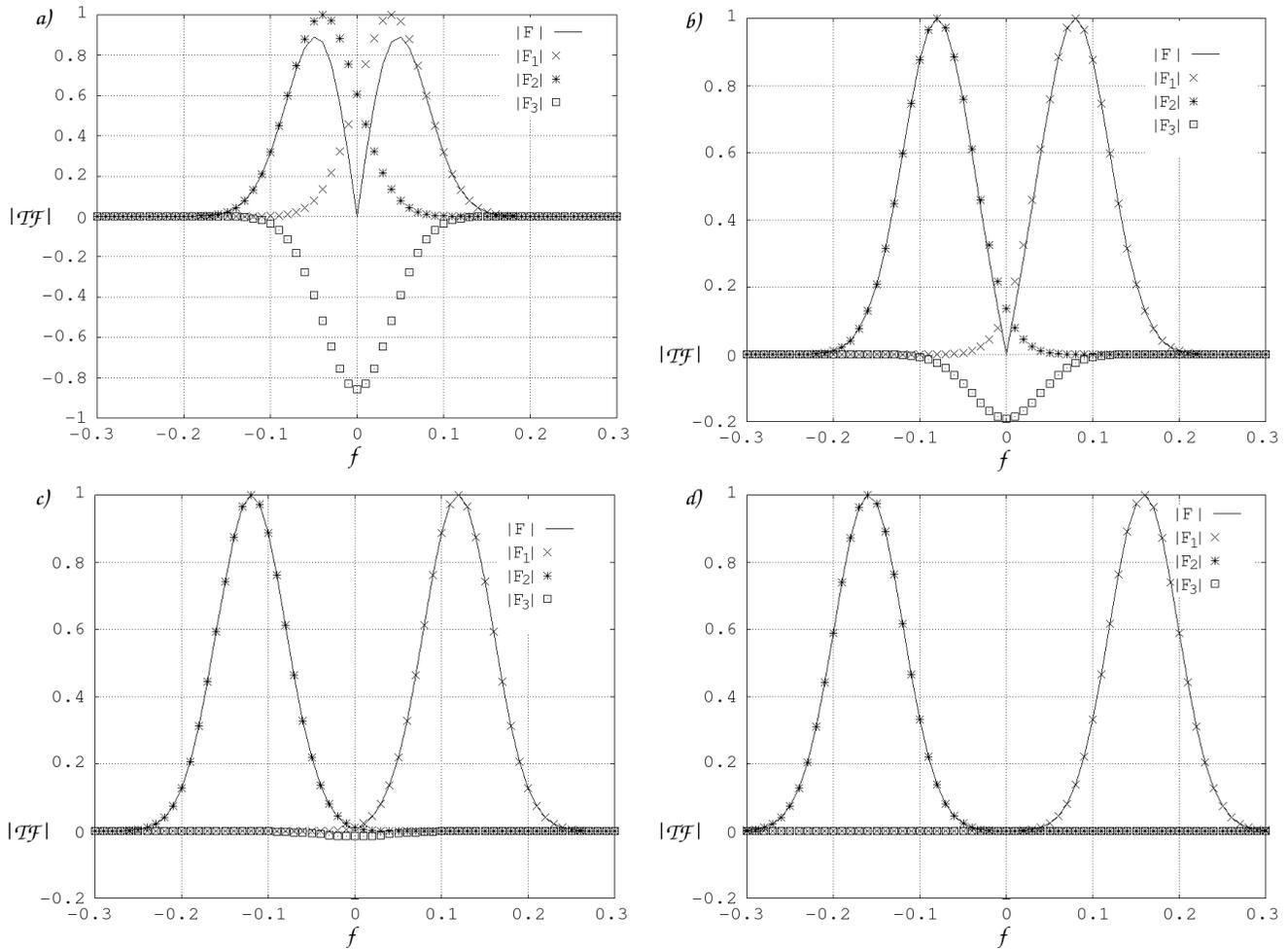


Figura 4.6: Amplitud de TF de un paquete gaussiano para $f_0 = \alpha\sigma_f$. a) $\alpha = 1$. $|F|$ no coincide con $|F_1| + |F_2|$ ya que $|F_3|$ es considerable b) $\alpha = 2$. $|F|$ difiere de $|F_1| + |F_2|$ en valores cercanos a cero, valores donde todavía persiste $|F_3|$ c) $\alpha = 3$. A simple vista todos los puntos de $|F|$ coinciden con $|F_1| + |F_2|$, pero todavía existe un pequeño valor de $|F_3|$ d) $\alpha = 4$. $|F_3|$ no es comparable a $|F_1|$ ni con $|F_2|$ y $|F|$ corresponde en todos los puntos visibles a $|F_1| + |F_2|$.

podemos considerar (4.44) como la amplitud de la transformada del paquete gaussiano. Pero, por otro lado σ_f esta definido por la expresión (D.22). Sustituyendo (D.22)

$$\sigma_f = \frac{1}{2\pi\sigma_t} \quad (4.48)$$

en (4.47):

$$f_0 > \frac{3}{2\pi\sigma_t} \quad (4.49)$$

Y si consideramos que el paquete gaussiano contiene β número de períodos en su ATMM:

$$2\sigma_t = \frac{\beta}{f_0} \quad (4.50)$$

Si se sustituye la expresión (4.50) en (4.49) se puede encontrar que:

$$\beta > \frac{3}{\pi} \approx 0.95 \quad (4.51)$$

Lo cual nos indica que el paquete gaussiano (4.42) debe de tener por lo menos un período en su ATMM para que la amplitud de su transformada de Fourier sea dos pulsos gaussianos centrados en $-f_0$ y $+f_0$. Esto último también se puede analizar en función de la correspondencia del ATMM en el dominio del tiempo ($ATMM_t$) con el ATMM en el dominio de la frecuencia ($ATMM_f$), es decir de las componentes en frecuencia que contiene un paquete gaussiano temporal. Sustituyendo (4.50) en (4.48):

$$\sigma_f = \frac{f_0}{\beta\pi} \quad (4.52)$$

Donde : $\beta > 1$ según (4.51)

Está última relación (4.52) es la que nos localiza el espectro en la frecuencia según el número de periodos que se incluya dentro del ATMM de la envolvente del paquete gaussiano (4.42).

4.6.3. Haz

Otro tipo de fuente muy usada en el FDTD es la fuente tipo haz, es decir luz colimada. En el caso de que la geometría (figura 2.4) permite reducir el problema a 1D, todas las fuentes se propagan en una línea recta así que no es necesario hacer alguna modificación a las fuentes en 1D. sin embargo, en 2D y 3D se necesita pulsar espacialmente la fuente para definir una trayectoria confinada.

Como se menciona en la sección 4.6.1, una fuente se define en un punto (o espacio) en específico y ésta evoluciona propagándose según sean sus características propias y del medio con el que interactúa. Acorde con esto, definiremos una fuente tipo haz en 2D para el FDTD como una distribución gaussiana espacial de funciones oscilantes de la forma (4.37) la cual debe ser tal que se propaga manteniendo en lo más posible su distribución espacial inicial. Véase la figura 4.7.

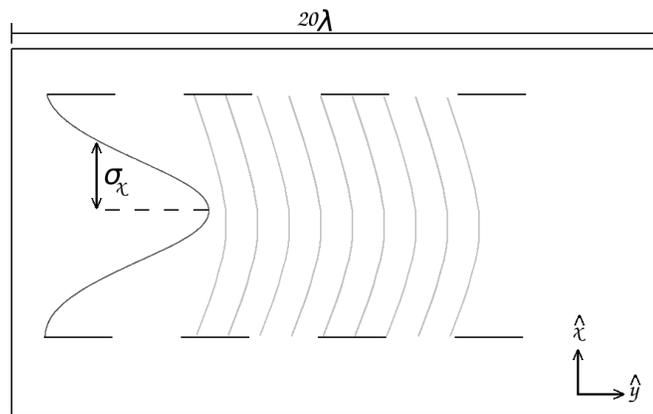


Figura 4.7: Definición de una fuente tipo haz en 2D para FDTD. Se define una distribución espacial constante en una dirección y si dicha distribución se mantiene considerablemente al propagarse la fuente, entonces se considera una fuente tipo haz.

Con ayuda de la transformada de Fourier podemos hacer un análisis con el fin de encontrar cuales son las condiciones para que se forme con éxito la fuente tipo haz. De las soluciones básicas (2.12) (2.13) de la ecuación de onda 2.14 se puede formar una

solución general de la forma:

$$u(\vec{x}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t)} d\vec{k} \quad (4.53)$$

Donde $A(\vec{k})$ describe las propiedades de una superposición lineal y esta dada por la transformada de Fourier de la distribución espacial inicial de la fuente:

$$A(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} u(\vec{x}, 0) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} d\vec{x} \quad (4.54)$$

Si definimos un perfil espacial gaussiano a lo largo del eje x , se esperaría un haz como se muestra en la figura 4.7. Entonces $u(\vec{x}, 0)$ es:

$$u(\vec{x}, 0) = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma_x}\right)^2} e^{ik_0 y} \quad (4.55)$$

Y al sustituir en (4.54) y hacer las integrales:

$$A(\vec{k}) = \sqrt{2\pi}\sigma_x e^{-\frac{1}{2}\sigma_x^2 k_x^2 + ik_x x_0} \delta(k_y + k_0) \quad (4.56)$$

Y después sustituimos en (4.53) considerando solo valores propagantes del campo ($k_x < k_0$) tenemos:

$$u(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{1 + i\frac{ct}{k_0\sigma_x^2}}} e^{-ik_0(y-ct)} e^{-\frac{1}{2}\frac{(x+x_0)^2}{\sigma_x^2 + i\frac{ct}{k_0}}} \quad (4.57)$$

En esta última expresión se aprecia que tenemos de nuevo un perfil espacial gaussiano con desviación estandar $\sigma(t) = \sqrt{\sigma_x^2 + \left(\frac{ct}{\sigma_x k_0}\right)^2}$. Si definimos: $\sigma_x = \alpha\lambda$, $ct = \beta\lambda$ y sustituimos $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$:

$$\sigma(t) = \lambda \sqrt{\alpha^2 + \left(\frac{\beta}{2\pi\alpha}\right)^2} \quad (4.58)$$

Se ve fácilmente que el criterio para tener una fuente tipo haz es que $\alpha \gg \beta$. Pero se busca que la fuente tipo haz pueda propagarse varias longitudes de ondas para fines prácticos, así que si fijamos $\lambda = 657nm$ y evaluamos para varios valores de α , como se muestra en la figura 4.8, vemos que la fuente se deforma demasiado para valores de $\alpha \ll 1$.

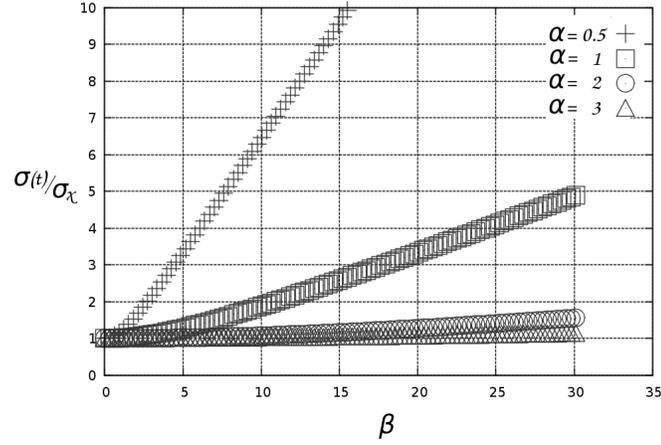


Figura 4.8: Evolución de la desviación estándar para una fuente tipo haz según (4.58) con $\lambda = 657nm$

4.6.4. Fuente evanescente

La fuente evanescente echa de forma artificial dentro del FDTD esta basada en la formulación que desarrollamos para un haz con cierto angulo de inclinación con respecto a la linea donde se definen los puntos que forman la fuente (ver sección anterior). La fuente de tipo haz inclinado se crea a partir de agregar los desfazamientos necesarios al campo que definimos punto por punto tales que el campo tengan la misma fase cuando alcancen una linea imaginaria, la cual representa el frente de onda que queremos generar. En la figura 4.9 se ilustra esto. En general, la distancia desde un punto del origen de la fuente hasta la linea imaginaria que representa el frente de onda deseado es:

$$d_n = x_n \sin(\theta) \quad (4.59)$$

Donde θ es la inclinación deseada del haz y x_n es la distancia vertical de un punto de la fuente inicial. Y el desfaze necesario para que dicho punto tenga fase ωt es:

$$\phi_n = 2\pi \frac{x_n}{\lambda} \sin(\theta) \quad (4.60)$$

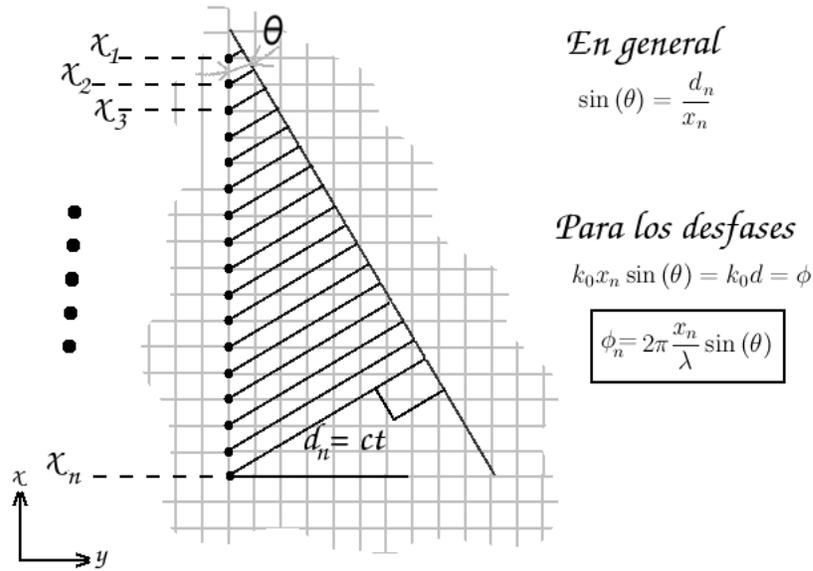


Figura 4.9: Formulación de una haz inclinado dentro del FDTD

Entonces el campo definido por cada punto de la fuente tipo haz inclinado tiene la forma:

$$f(\omega, t) = f(\omega t + \phi_n) \quad (4.61)$$

Notese que (4.60) es la proyección del vector de onda \vec{k} del campo multiplicada por la distancia x_n . Ahora, para generar una fuente evanescente, solo tenemos que sustituir un valor de $k_{k_0 \sin \theta = k} > \frac{\omega}{c}$. Resulta conveniente definir esta fuente como una fuente pulsada en el tiempo, para así tener un control sobre las componentes en ω también (como se había mencionado en la sección 3.6 expresión (3.47)). El campo obtenido se muestra en la figura 4.10.



Figura 4.10: Fuente evanescente creada en el FDTD

4.7. Transformada de Fourier discreta

Suponiendo que se quiera calcular la transformada de Fourier de $\varphi(t)$, según la definición (D.1):

$$\Phi(f_0) = \int_{t_i}^{t_f} \varphi(t) e^{-i2\pi f_0 t} dt \quad (4.62)$$

Donde los límites de la integral, t_i y t_f , corresponden al tiempo inicial y al final del FDTD. Es decir, $t_i = 0$ (inicio de la evolución temporal de los campos en el FDTD) y t_f el tiempo al cual las iteraciones del FDTD son detenidas.

Reescribiendo (4.62) como una sumatoria discreta:

$$\Phi(f_0) = \sum_{n=0}^N \varphi(n\Delta_t) e^{-i2\pi f_0 n\Delta_t}$$

$$\text{Donde :} \quad t = n\Delta_t \quad (4.63)$$

$$t_f = N\Delta_t$$

Y si separamos el exponencial en su parte real e imaginaria:

$$\Phi(f_0) = \sum_{n=0}^N \varphi(n\Delta_t) \cos(2\pi f_0 n\Delta_t) - i \sum_{n=0}^N \varphi(n\Delta_t) \sin(2\pi f_0 n\Delta_t) \quad (4.64)$$

Lo cual puede ser implementado dentro el FDTD como:

$$\begin{aligned} \text{realpt}(i, j, k) &= \text{realpt}(i, j, k) + \varphi(i, j) \cos(2\pi f_0 n \Delta_t) \\ \text{imgpt}(i, j, k) &= \text{imgpt}(i, j, k) + \varphi(i, j) \sin(2\pi f_0 n \Delta_t) \end{aligned} \quad (4.65)$$

Donde (i, j) especifican la posición espacial donde se calcula la transformada y k se usa para indexar un determinado número de frecuencias. Entonces es posible, que para cada punto y frecuencia involucrados en (4.65), calcular la amplitud de la transformada de Fourier:

$$\text{amp}(i, j, k) = \text{sqr}t((\text{realpt}(i, j, k)) * *2 + (\text{imgpt}(i, j, k)) * *2) \quad (4.66)$$

4.8. Validación de la implementación del FDTD

Es importante confirmar que nuestra implementación del FDTD es correcta ya que resulta muy común cometer errores cuando se están codificando las expresiones. Para esto compararemos resultados físicos muy conocidos, primero en 1D y después en 2D.

4.8.1. 1D

Consideramos primero el problema de calcular la reflexión para una película de grosor d en 1D como se muestra en la figura 4.11. Que para medios isotrópicos, homogéneos y asumiendo que se hace incidir luz monocromática, se tiene un coeficiente de reflexión para polarización P [19]:

$$r = \frac{r_{12} + r_{23}e^{i2k_2d}}{1 + r_{12}r_{23}e^{i2k_2d}} \quad (4.67)$$

Donde:

$$r_{12} = \frac{\frac{K_1}{\epsilon_{r1}} - \frac{K_2}{\epsilon_{r2}}}{\frac{K_1}{\epsilon_{r1}} + \frac{K_2}{\epsilon_{r2}}} \quad y \quad r_{23} = \frac{\frac{K_2}{\epsilon_{r2}} - \frac{K_1}{\epsilon_{r1}}}{\frac{K_2}{\epsilon_{r2}} + \frac{K_1}{\epsilon_{r1}}} \quad (4.68)$$

Sustituyendo $\epsilon_{r1} = 1$, $\epsilon_{r2} = \epsilon(\omega)$ (función dieléctrica de Drude (3.35)), $k_1 = \frac{\omega}{c}$ y $k_2 = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon(\omega)}$, nos queda:

$$r_{12} = \frac{\sqrt{\epsilon(\omega)} - 1}{1 + \sqrt{\epsilon(\omega)}} \quad y \quad r_{23} = -r_{12} \quad (4.69)$$

Si evaluamos la expresión (4.67) con los parámetros:

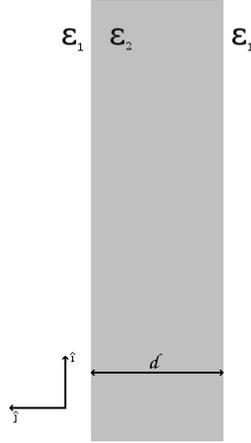


Figura 4.11: Medios infinitos en dirección \hat{i} y \hat{k} que forman un película de grosor d en la dirección \hat{j} . Donde $\epsilon_{r1} = 1$ (vacío) y $\epsilon_{r2} = \epsilon(\omega)$ (Drude (3.35)).

- $d = \lambda_p$. Donde $\lambda_p = \frac{c}{f_p}$ es la longitud de onda en el vacío para una fuente con frecuencia $f_0 = f_p$, siendo $f_p = 912.60582 \times 10^{12} Hz$ la frecuencia de plasma del metal $\epsilon(\omega)$.
- $\gamma = \frac{\omega_p}{100}$, la cual representa la parte absorbente del metal $\epsilon(\omega)$ de Drude.
- ω desde $0.2\omega_p$ hasta $1.5\omega_p$ ($\omega_p = 2\pi f_p$)

obtenemos la amplitud del coeficiente de reflexión de Fresnel. En la figura 4.13 se muestra graficada su amplitud R en función de ω .

Por otro lado podemos reproducir este resultado si se implementan las expresiones básicas del FDTD (4.2) para los campos. Definimos un medio metálico con las expresiones de la sección 4.5.2 que se ajusten a las especificaciones de la figura 4.11, y usando

una fuente de tipo paquete gaussiana según la sección 4.6.2 para obtener un amplio espectro en frecuencia y por último usando la definición de la transformada de Fourier para el FDTD de la sección 4.7 para analizar dicho espectro. Para obtener resultados correctos es necesario fijar un tamaño de partición adecuado para representar los campos, se recomienda que se tengan como mínimo 10 particiones por longitud de onda del campo con la frecuencia más alta a considerar en los cálculos. Pero por otro lado, del teorema de Nyquist-Shannon[20] del muestreo, se debe de considerar 2 veces la frecuencia más alta dentro de los cálculos para poder tener una representación correcta del espectro en frecuencias. Definiendo entonces Δ_s :

$$\Delta_s = \frac{c}{kf_p} \quad (4.70)$$

Siendo k un número por determinar. Y definiendo un rango de frecuencias de interés como por ejemplo:

$$f = \varkappa f_p$$

Donde : (4.71)

$$\varkappa = 0.2 \rightarrow 1.5$$

Ahora definimos λ_{Δ_s} como el número de Δ_s para representar λ :

$$\begin{aligned} \lambda_{\Delta_s} &= \frac{c}{\Delta_s f} \\ &= \frac{c}{\frac{c}{kf_p} \varkappa f_p} \\ &= \frac{k}{\varkappa} \end{aligned} \quad (4.72)$$

Tomando el máximo valor de $\varkappa = 1.5$ y que debemos tener por lo menos $10\Delta_s$ en $\lambda_{\Delta_s}|_{\varkappa=1.5}$, y considerando $2\varkappa$ para una buena representación en el espectro de frecuencias nos queda:

$$\begin{aligned} \lambda_{\Delta_s} &= \frac{k}{2(1.5)} = 10 \\ &\rightarrow k = 30 \end{aligned} \quad (4.73)$$

Definiendo así el valor de $\Delta_s = 10.95nm$ según (4.70). Para reducir el número de veces que hay que repetir el FDTD, en el caso de que un solo paquete gaussiano no tenga las componentes en frecuencia requeridas, se buscan los valores del parámetro \varkappa tal que el espectro en frecuencia del campo incidente se aproveche al máximo, es decir los valores de \varkappa que hacen que las gaussianas se traslapen en $\pm\sigma_f$ como se muestra en la figura 4.12. Para los dos primeras gaussianas se requiere que:

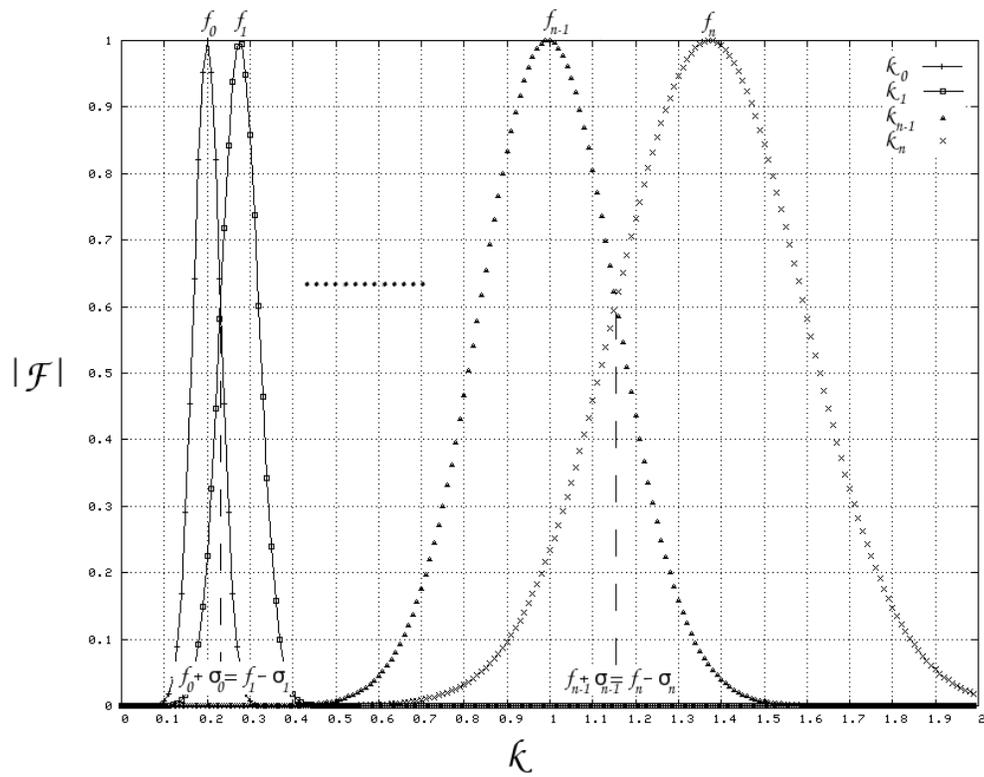


Figura 4.12: Desplazamiento del espectro en frecuencias del campo incidente al variar el parámetro \varkappa que define la frecuencia central de este.

$$f_0 + \sigma_{0f} = f_1 - \sigma_{1f} \quad (4.74)$$

Considerando que hay β periodos dentro del paquete gaussiano, sustituyendo la relación (4.52) y (4.71) en (4.74):

$$\varkappa_0 f p + \frac{\varkappa_0 f p}{\beta \pi} = \varkappa_1 f p - \frac{\varkappa_1 f p}{\beta \pi} \quad (4.75)$$

Resolviendo para \varkappa_1 :

$$\varkappa_1 = \varkappa_0 \frac{\beta \pi + 1}{\beta \pi - 1} \quad (4.76)$$

Ahora si aplicamos la misma condición entre las \varkappa 's contiguas, es decir:

$$\begin{aligned} f_1 + \sigma_{1f} &= f_2 - \sigma_{2f} \\ f_2 + \sigma_{2f} &= f_3 - \sigma_{3f} \\ &\vdots \\ f_{n-1} + \sigma_{(n-1)f} &= f_n - \sigma_{nf} \end{aligned} \quad (4.77)$$

Se encuentra que:

$$\varkappa_n = \varkappa_0 \left(\frac{\beta \pi + 1}{\beta \pi - 1} \right)^{n-1} \quad (4.78)$$

Donde $\varkappa_0 = 0.2$. Y de esta última expresión se puede despejar:

$$n = \text{int} \left(\frac{\ln \left[\frac{\varkappa_n \left(\frac{\beta \pi + 1}{\beta \pi - 1} \right)}{\varkappa_0} \right]}{\ln \left(\frac{\beta \pi + 1}{\beta \pi - 1} \right)} \right) \quad (4.79)$$

Donde *int* significa que solo se toma la parte entera, $\varkappa_n = 1.5$ es el valor más alto de \varkappa que nos interesa que esté dentro del espectro en frecuencias. Para el espectro en frecuencia más amplio, $\beta = 1$ según (4.52), tenemos que $n = 4$. Y de la relación recurrente (4.78) podemos calcular los valores de la tabla 4.1 donde se muestran el alcance en frecuencia de cada paquete gaussiano centrado en $\varkappa_n f_p$.

Por último, usando los pulsos gaussianos según los valores de la tabla 4.1 dentro del FDTD, podemos obtener una solución aproximada del coeficiente de reflexión como se muestra en la figura 4.13.

n	\varkappa_n	$(f_n - \sigma_{f_n})/f_p$	$(f_n + \sigma_{f_n})/f_p$
1	0.2	0.136338	0.26366
2	0.38677	0.263661	0.50989
3	0.7479	0.509891	0.98607
4	1.4465	0.986071	1.90694

Tabla 4.1: Valores de \varkappa para $\beta = 1$ que definen las frecuencias centrales de los paquetes gaussiano y el ancho de sus espectros.

4.8.2. 2D

Para el caso en 2D usaremos una barra de metal de largo y ancho finito y con una rejilla en su superficie frontal como se muestra en la figura 4.14 la cual iluminaremos de con incidencia normal con una fuente tipo haz, la cual se describió en la sección 4.6.3.

Se sabe que para un haz con incidencia normal $K_{\parallel} = 0$ y que la contribución en K_{\parallel} de la rejilla es de $G_m = \pm \frac{2\pi}{L}m$, donde L es la constante de periodicidad de la rejilla y m es el orden de difracción. Para el vacío tenemos que

$$K_{\perp}^2 + \left(K_{\parallel} \pm G_m \right)^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (4.80)$$

Y por otro lado

$$K_{\perp} = \frac{\omega}{c} \cos(\theta) \quad (4.81)$$

Entonces sustituyendo (4.81) en (4.80) y simplificando nos queda una expresión que relaciona los ángulos con respecto a la normal de la rejilla de los diferentes órdenes de difracción con la longitud de onda incidente y la constante L de la rejilla:

$$\sqrt{1 - \left(\frac{\lambda}{L}m \right)^2} = \cos(\theta) \quad (4.82)$$

Donde es fácil ver que para tener al menos un haz difractado es necesario que

$$\lambda < L \quad (4.83)$$

Y que para el caso limite de $\lambda = L$, $\theta_{m=\pm 1} = 90^\circ$. Entonces, fijando la constante L de la rejilla al valor más grande de las longitudes de onda incidentes, podemos tener

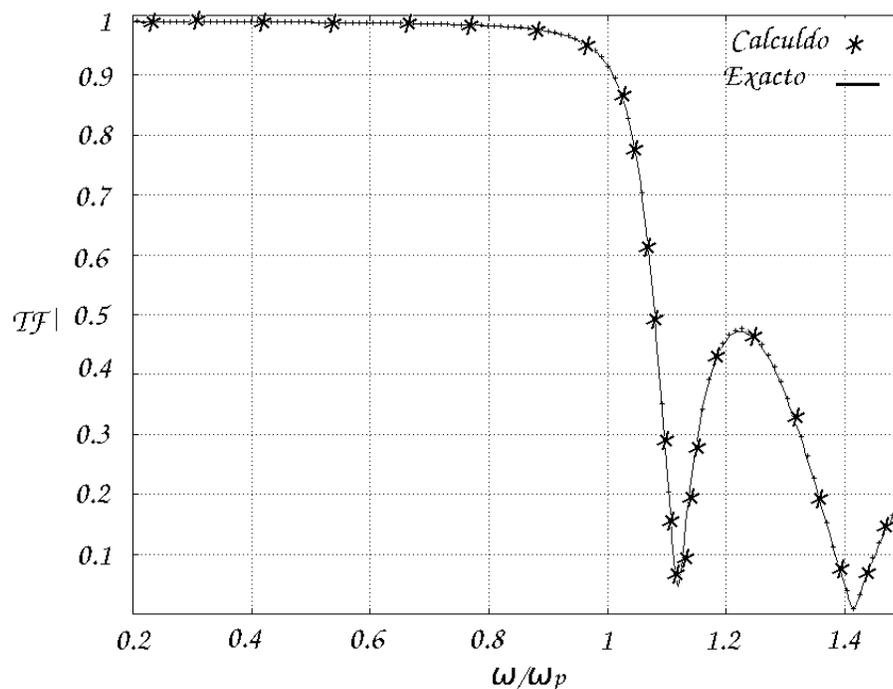


Figura 4.13: Coeficiente de reflexión R para una película de metal con $f_p = 912.60582 \times 10^{12} 1/s$ y con un grosor d . Valor exacto $-$. Valor calculado con FDTD $*$

diferentes grados de inclinación de los órdenes difractados para diferentes longitudes de onda como se muestra en la tabla 4.2.

$\frac{\lambda_p}{\lambda}$	$\theta_{m=\pm 1}$	$\theta_{m=\pm 2}$	$\theta_{m=\pm 3}$
0.3	90^0	-	-
0.5	$\pm 36.87^0$	-	-
0.7	$\pm 25.37^0$	$\pm 59^0$	-
0.9	$\pm 19.47^0$	$\pm 41.81^0$	89^0

Tabla 4.2: Valores de los ángulos de los 3 primeros órdenes de difracción para diferentes longitudes de onda incidente con una constante de rejilla de $L = \frac{\lambda_p}{0.3}$. Con $\lambda_p = \frac{c}{f_p}$

La figura 4.16 muestra los campos obtenidos en el FDTD después de 12×10^3 pasos temporales para las longitudes de onda incidentes de la tabla 4.2. Para medir los ángulos de los haces difractados es necesario definir el centro del frente de la onda difractada

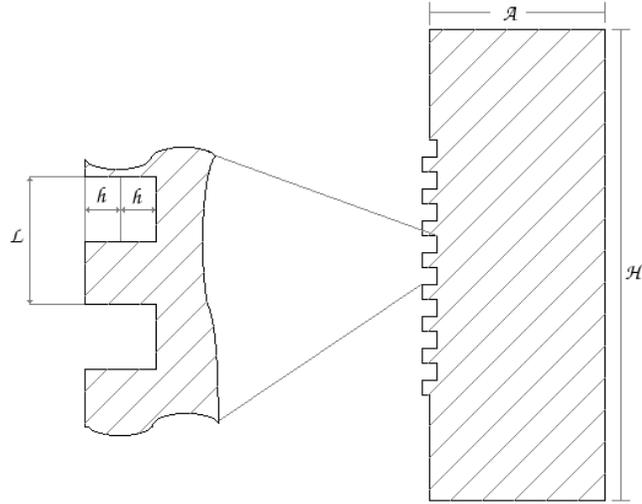


Figura 4.14: Barra de metal de largo H y ancho A con rejillas en un lado con periodicidad L y altura h

como el punto más intenso de dicho frente, la figura 4.15 muestra los centros de las ondas difractadas para las longitudes de onda incidente. Una vez conocido el centro del frente de una onda difractada y la distancia a la cual se tiene dicho frente con respecto a el origen de la difracción (en éste caso la rejilla) es fácil calcular el ángulo del haz difractado:

$$\theta_d = \tan^{-1} \left(\frac{2400 - x_{centro}}{2990 - y} \right) \quad (4.84)$$

Donde: 2400 es el centro del haz secular, x_{centro} es el centro del haz difractado, 2990 es la posición de la rejilla y y es la distancia a la cual se tiene el centro del haz difractado en x_{centro} . Sustituyendo las distancias obtenidas de 4.15 al hacer la mediciones a las distancias de la rejilla como se muestran en 4.16 en la expresión 4.84 obtenemos los valores de la tabla 4.3, los cuales son muy aproximados a los exactos.

$\frac{\lambda_p}{\lambda}$	$\theta_{m=\pm 1}$	$\theta_{m=\pm 2}$	$\theta_{m=\pm 3}$
0.3	$\approx 90^0$	–	–
0.5	$\pm 36.36^0$	–	–
0.7	$\pm 25.05^0$	$\pm 58.62^0$	–
0.9	$\pm 20.04^0$	$\pm 42.71^0$	$\approx 89^0$

Tabla 4.3: Valores de los ángulos de los 3 primeros órdenes de difracción para diferentes longitudes de onda incidente con una constante de rejilla de $L = \frac{\lambda_p}{0.3}$ calculados en el FDTD

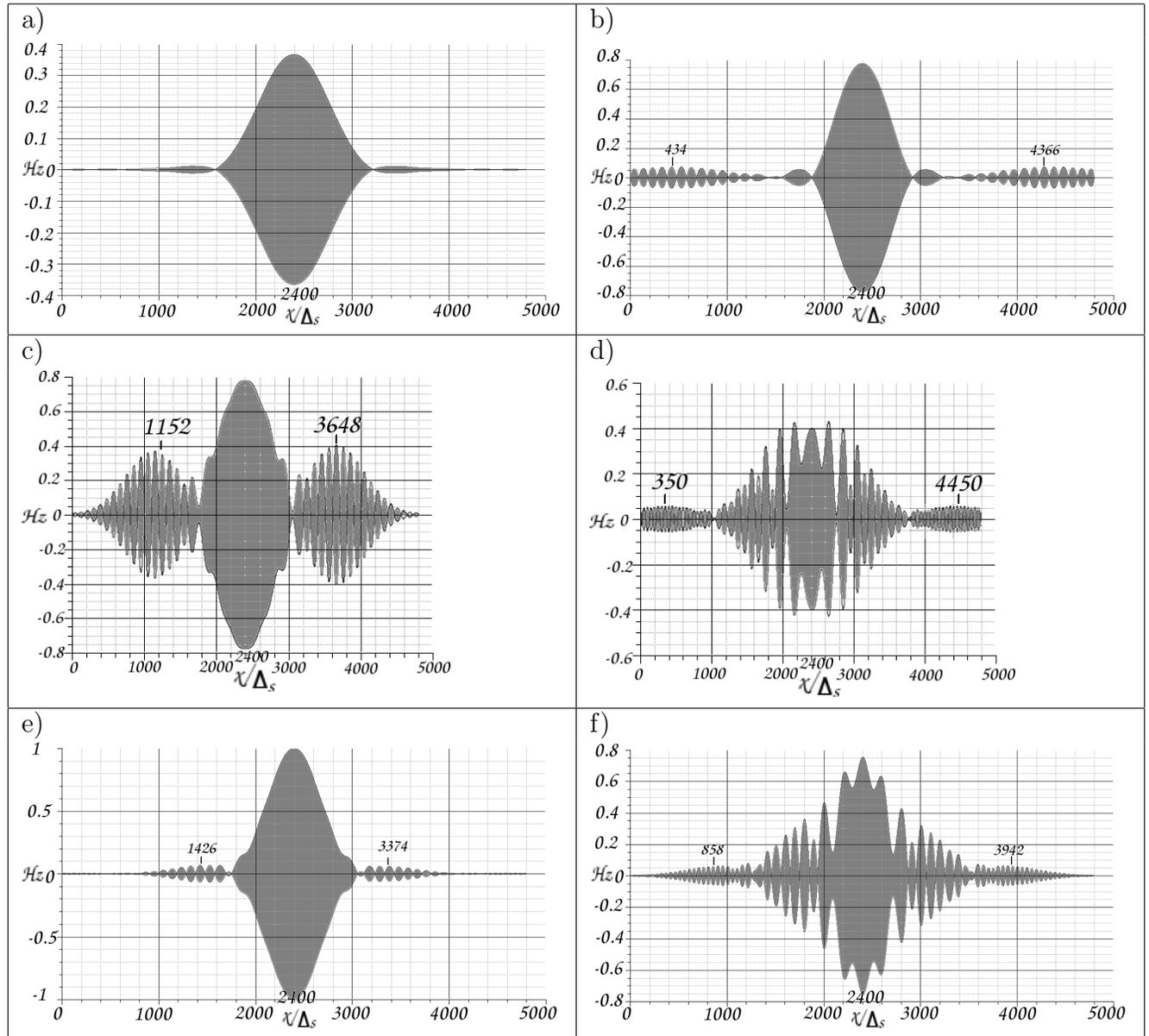


Figura 4.15: Campo $|H_z|$ a lo largo de una distancia y fija de la barra de metal para ver el centro de los haces difractados. En todas se puede ver el orden secular que está centrado en 2400. a) Corresponde al campo de la figura 4.16.a, $\lambda = \frac{\lambda_p}{0.3}$, $y = 320$, solo se tiene el orden secular. b) Corresponde al campo de la figura 4.16.b, $\lambda = \frac{\lambda_p}{0.5}$, $y = 320$. c) y d) Corresponde al campo de la figura 4.16.c, $\lambda = \frac{\lambda_p}{0.7}$, para c) $y = 320$ y para d) $y = 1740$. e) y f) Corresponde al campo de la figura 4.16.d, $\lambda = \frac{\lambda_p}{0.9}$, para e) $y = 320$ y para f) $y = 1320$.

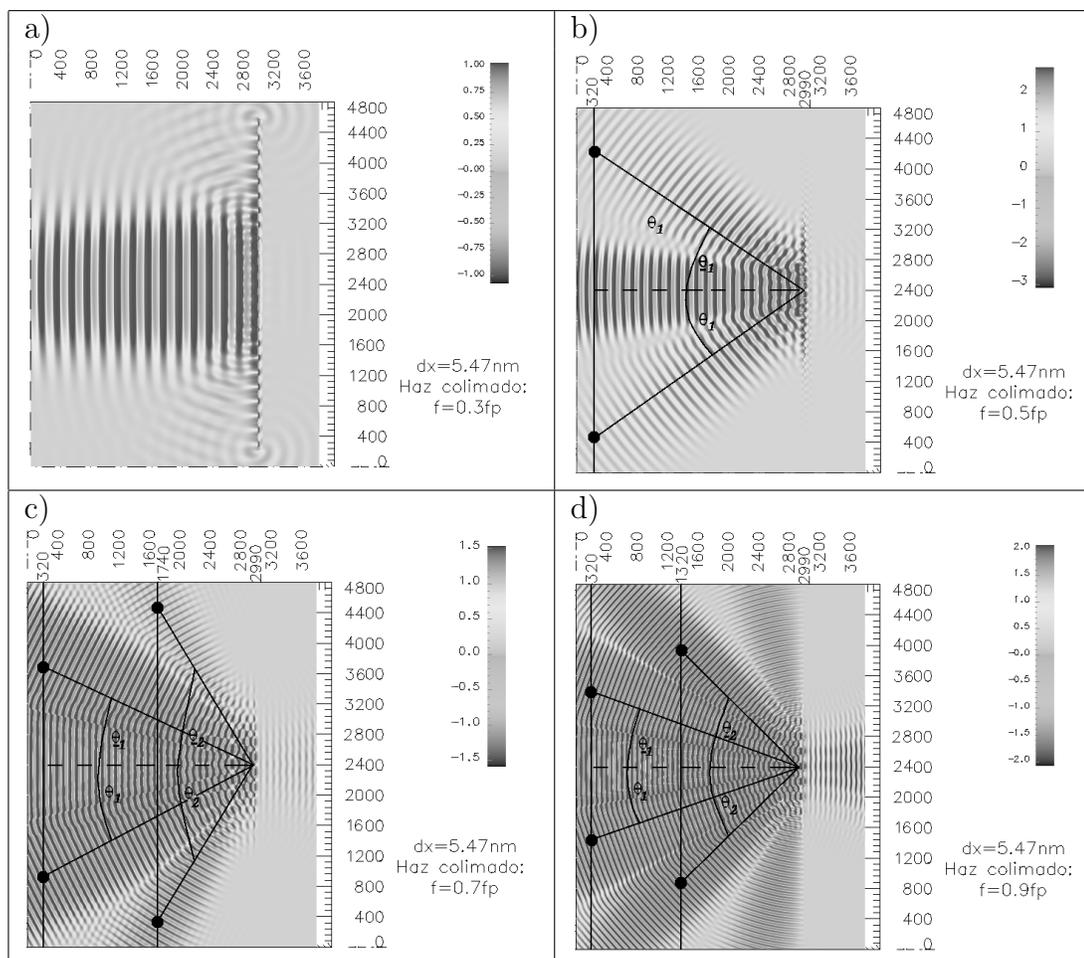


Figura 4.16: Haces difractados para diferentes longitudes de onda incidentes en el FDTD. La rejilla está en $y = 2990$. a) $\lambda = \frac{\lambda_p}{0.3}$. b) $\lambda = \frac{\lambda_p}{0.5}$. c) $\lambda = \frac{\lambda_p}{0.7}$. d) $\lambda = \frac{\lambda_p}{0.9}$

Capítulo 5

Interacción de un plasmón de superficie con una discontinuidad en la superficie del metal

5.1. Motivación del problema

Uno de los problemas que recientemente ha provocado una variedad sorprendente de trabajos, tanto en intentos por desarrollar nuevas aplicaciones como en explicar las causas del fenómeno en sí, es la transmisión de luz a través de un metal con orificios del orden de una fracción de longitud de onda. Algunas de las tantas aplicaciones predecibles para este principio es, en el área de la opto-electrónica por ejemplo, extraer más luz de los dispositivos emisores de luz, desarrollos de medios de almacenamiento de datos ultra-densos, novedosos dispositivos lógicos nano-ópticos, etc.

Resultados relativamente recientes de experimentos han demostrado que los plasmones de superficie ayudan u obstruyen dicha transmisión de luz [21]. La cuestión es bajo que condiciones los plasmones provocan ese fenómeno.

En este trabajo de tesis se estudia el comportamiento de los plasmones de superficie cuando llegan a una discontinuidad en la superficie del metal, es decir una esquina de ésta. Para esto usaremos una fuente evanescente hecha de manera artificial dentro del

FDTD que colocaremos cerca de una interfaz vacío-metal para excitar de manera selectiva los plasmones de superficie según la relación de dispersión (3.42). Se hará especial énfasis en la transmisión de un plasmón de superficie a la superficie de al lado; este resultado es importante puesto que no son necesarios la periodicidad o un agujero para generar un plasmón de superficie en una guía metálica.

5.2. Estudio de plasmones de superficie con FDTD

Consideremos una fuente de la forma (3.47) en el vacío como el campo incidente, entonces el decaimiento está determinado por (3.27), de forma que la distancia a la cuál el campo decae a $\frac{1}{e}$ % es cuando

$$d = \frac{1}{\text{imag}\{k_{\perp}\}} \quad (5.1)$$

Donde k_{\perp} está determinado por (3.37)

$$|k_{\perp}| = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon - k_{\parallel}^2}$$

$\epsilon = \epsilon_0$ y k_{\parallel} está dada por la relación de dispersión de los modos superficiales no radiativos (3.42) y considerando que

$$\omega = \varkappa\omega_p \quad (5.2)$$

Entonces k_{\perp} es, para $\omega_p = 5.76 \times 10^{15} \text{rad/s}$ y $\gamma \ll \omega_p$:

$$k_{\perp} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_0 - \frac{\varkappa^2 - 1}{2\varkappa^2 - 1}} \quad (5.3)$$

y sustituyendo en (5.1) tenemos la distancia más lejana a la cual la fuente debe colocarse de la barra de metal para lograr excitar los plasmones de superficie al variar el parámetro \varkappa . Los valores de dicha distancia se muestran en la figura 5.1 desde $\varkappa = 0.1$ hasta $\varkappa = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Se observa que para $\varkappa > 0.5$ se debe de tener especial cuidado para lograr excitar el

plasmón, ya que el campo incidente decae en una distancia mucho más corta, entre 10 y 2 pasos espaciales. De esta forma podemos generar plasmones de superficie y observar

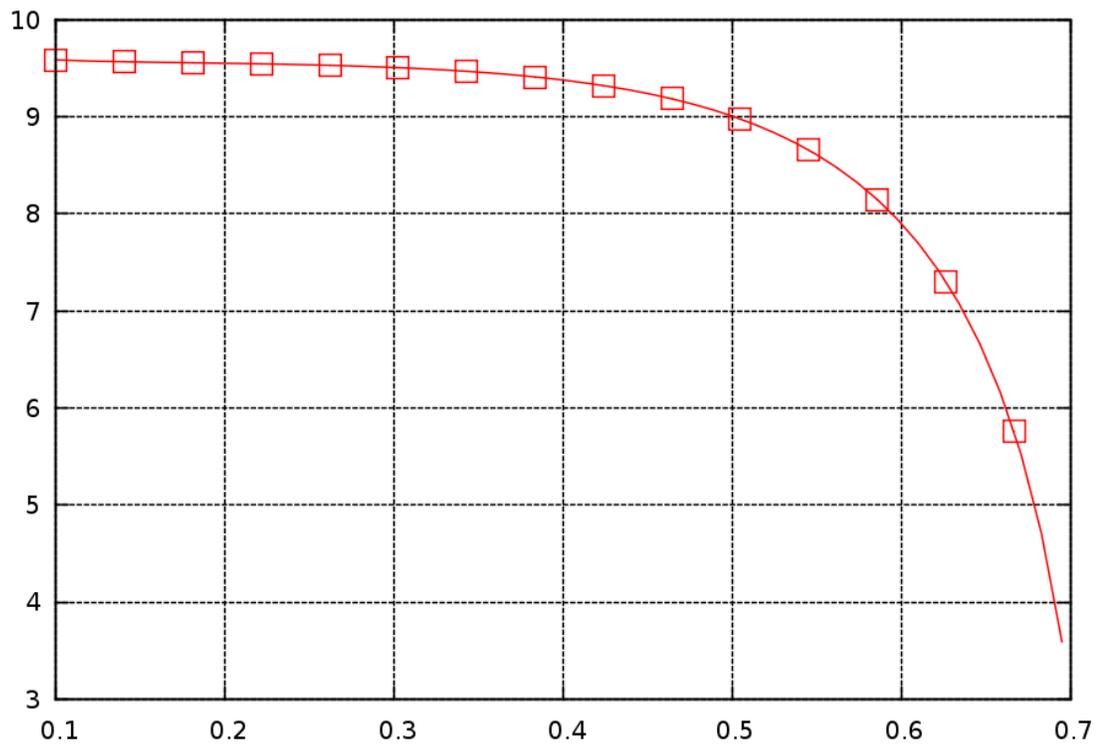


Figura 5.1: Distancia (5.1) a la cual el campo evanescente (3.47) decae al $\frac{1}{e}$ % en el vacío

su comportamiento a medida que se desplazan e interaccionan con la esquina de la barra. Existen tres posibilidades que podemos considerar, una es que el plasmón rebote en la esquina, otra es que radíe toda o parte de su energía y la última es que de la vuelta y continúe por la otra superficie que forma la esquina. Como veremos, ocurren las tres, y vamos a estudiar bajo que condiciones domina una u otra.

5.3. Excitación del plasmón de superficie con una fuente evanescente

Antes de continuar con el estudio del plasmón de superficie, comprobamos que cuando la fuente evanescente incidente tiene polarización S (como se describió en la sección 3.1.1) no hay generación del plasmón de superficie y por lo tanto no vemos ninguno de los tres efectos mencionados. La figura 5.2 muestra el campo para varios tiempos con polarización S. La fuente se desvanece sin producir una excitación visible.

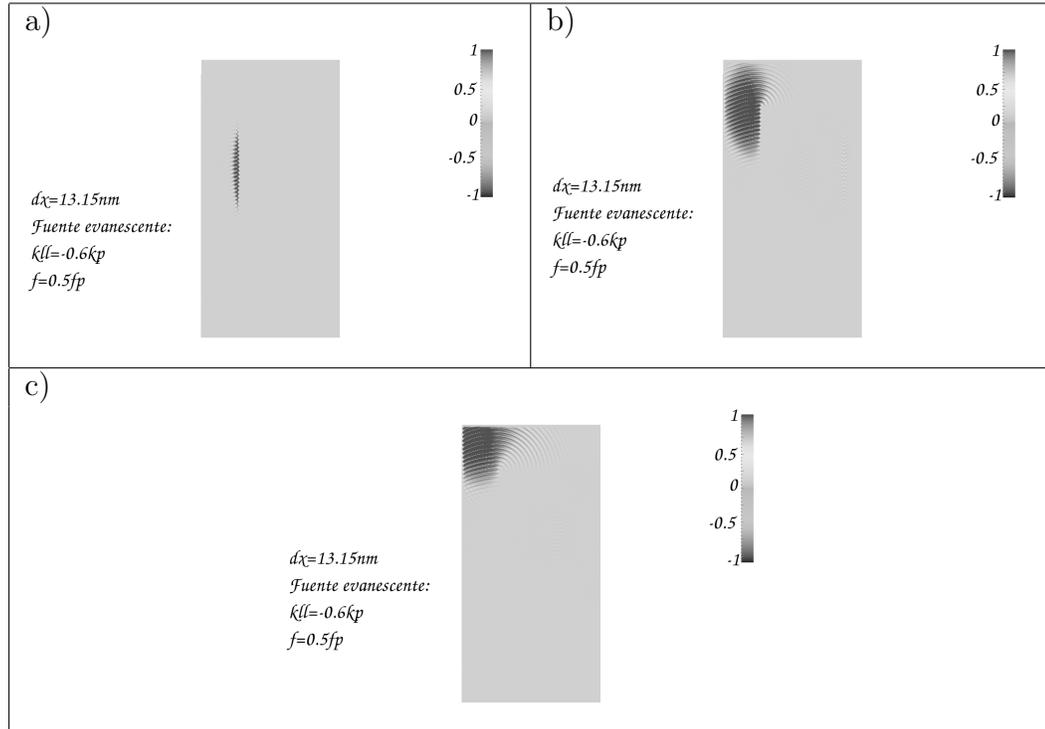


Figura 5.2: Fuente evanescente con polarización S con $\omega = 0.5\omega_p$, $k_{\parallel} = -0.6k_p$ y su máximo en $t = 4\sigma_t$. a) al tiempo $t = 4\sigma_t \approx 800\Delta_t$ b) al tiempo $t = 8\sigma_t \approx 1600\Delta_t$ c) al tiempo $t = 16\sigma_t \approx 3200\Delta_t$

Ahora ponemos la fuente evanescente con polarización P pulsada de forma gaussiana temporal y espacialmente, con frecuencia central $\omega = \alpha\omega_p$ y desviación estándar

temporal $\sigma_t = \aleph T$, y con k central $k_{\parallel} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{1-\alpha^2}{1-2\alpha^2}}$ ¹ y desviación estándar espacial $\sigma_s = \beta\lambda$. Del ancho espacial y del temporal de las envolventes gaussianas podemos definir, por medio de la transformada de Fourier, un ancho en k_{\parallel} y en ω que nos localiza el plasmón de superficie en la relación de dispersión (3.42) como una área determinada, esto se aprecia en la figura 5.3.

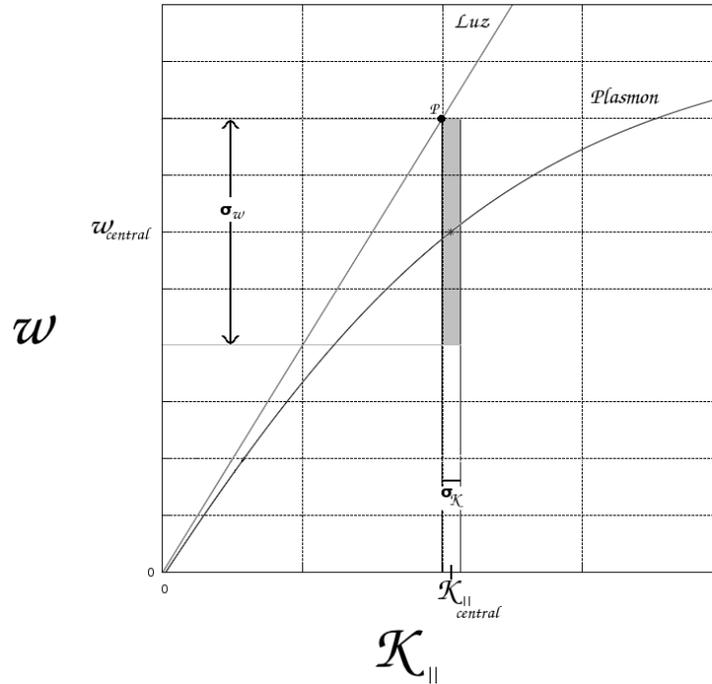


Figura 5.3: Indeterminación del plasmón de superficie excitado con una fuente evanescente. luz: línea de luz. Plasmon: Relación de dispersión (3.42) con $\omega_p = 5.76 \times 10^{15} \text{ rad/s}$ y $\gamma = \frac{\omega_p}{100}$. $\omega_{central}$ y $k_{\parallel central}$ son tales que satisfacen (3.42) y, $\sigma_\omega = \frac{1}{\sigma_t}$ y $\sigma_k = \frac{1}{\sigma_s}$ están definidos por medio de la transformada de Fourier de las envolventes gaussianas.

Para mantener la fuente incidente como una fuente puramente evanescente, es necesario que el área definida por $\sigma_\omega \sigma_k$ quede al lado derecho de la línea de luz tal y como se muestra en la figura 5.3. Dado que las dimensiones del metal por donde se propaga el plasmón son finitas, no es posible hacer σ_k tan pequeña como se requiera. Considerando

¹ Sustituyendo $\omega = \alpha\omega_p$ en (3.42) y considerando que $\alpha\gamma \lll 1$

una barra de largo $l = 23.6\mu m$ y que el ancho máximo considerable de una distribución gaussiana es de $6\sigma^2$, entonces tenemos que el valor más grande que podemos tener en σ_x es de $l/6$. Si definimos

$$\sigma_x = \beta\lambda = \beta \frac{c}{\alpha f_p} \quad (5.4)$$

Donde β es el número de longitudes de onda dentro de σ_x , f_p es la frecuencia de plasma y definimos $f = \alpha f_p$ como la frecuencia central de la fuente incidente. Al sustituir el máximo valor que puede tomar σ_x en (5.4) tenemos que el número de longitudes de onda dentro σ_x del campo incidente es

$$\beta \leq \frac{l}{6} \frac{\alpha f_p}{c} \quad (5.5)$$

Ahora definimos el punto P como se muestra en la figura 5.3 como el valor más grande que se puede tener para σ_ω dada una frecuencia central. Entonces tenemos:

$$k_{\parallel Central} - \sigma_k = \frac{\omega}{c} \quad (5.6)$$

Sustituyendo la relación de dispersión (3.42) y simplificando, nos queda:

$$\alpha_c \sqrt{\frac{1 - \alpha_c^2}{1 - 2\alpha_c^2}} - \frac{\alpha_c}{\beta 2\pi} = \alpha_p \quad (5.7)$$

Donde $\alpha_c = \frac{\omega}{\omega_p}$ con $\omega = 2\pi\alpha_c f_p$ como frecuencia central de la fuente incidente y $\alpha_p = \frac{\omega_L}{\omega_p}$ con $\omega_L = 2\pi\alpha_p f_p$ como la frecuencia en el punto P . Ahora podemos expresar σ_ω como:

$$\sigma_\omega = (\alpha_p - \alpha_c) 2\pi f_p \quad (5.8)$$

Y por otro lado, si escribimos σ_t como un múltiplo del periodo

$$\sigma_t = \eta T = \frac{\eta}{\alpha_c f_p} \quad (5.9)$$

² De la sección 4.6.2 se tiene que a partir de 3σ del valor central no hay valores apreciables

Donde η es el número de periodos dentro de σ_t . Sustituyendo (5.7) en (5.8) y después en (5.9) considerando que $\sigma_t = 1/\sigma_\omega$, tenemos que el número de periodos dentro de σ_t del campo incidente es

$$\eta \geq \frac{1}{2\pi \left(\sqrt{\frac{1-\alpha_c^2}{1-2\alpha_c^2}} - 1 - \frac{1}{2\pi\beta_0} \right)} \quad (5.10)$$

Donde β_0 satisface la ecuación (5.5). Ahora, para obtener los parámetros de la fuente evanescente para excitar el plasmón de superficie de forma selectiva evaluamos la expresión (5.5) para un valor de α_c y después, dado β_0 de (5.5), evaluamos (5.10). Los valores de β y de η que usaremos para definir el campo incidente serán el entero más próximo hacia abajo y el entero más próximo hacia arriba respectivamente, esto con el fin de asegurar que el área que localiza el plasmón quede a la izquierda de la línea de luz; la figura 5.4 muestra el valor límite de estos parámetros así como los valores redondeados usados en el FDTD. Por comodidad es preferible que a partir de $\alpha \approx 0.47$ se mantenga el valor de $\eta = 2$.

La figura 5.5 muestra el campo para varios tiempos con polarización P y parámetros $\alpha = 0.5$, $\beta = 5$, $\eta = 2$ y $k_{\parallel} = -0.61$ para la fuente evanescente. En la secuencia podemos observar que se genera un plasmón de superficie que al llegar a la esquina una parte rebota, otra radía y otra más da la vuelta y continúa por la otra superficie. Inclusive podemos ver que al llegar a la otra esquina vuelve a ocurrir el mismo efecto. En la figura 5.6 se muestra el campo a lo largo de la interfaz vacío-metal al tiempo $t = t_0$, como se muestra en la figura 5.5.a. De acuerdo con la correspondencia entre los espacios $x \leftrightarrow k$ y $t \leftrightarrow \omega$, la relación de dispersión que se muestra en la figura 3.6 y los parámetros para el campo incidente como se muestran en la figura 5.4 con $\alpha = 0.5$ la longitud de onda del plasmón de superficie queda entre los valores $79.62\Delta_s$ y $83.88\Delta_s$, con $\Delta_s = 6.57nm$.

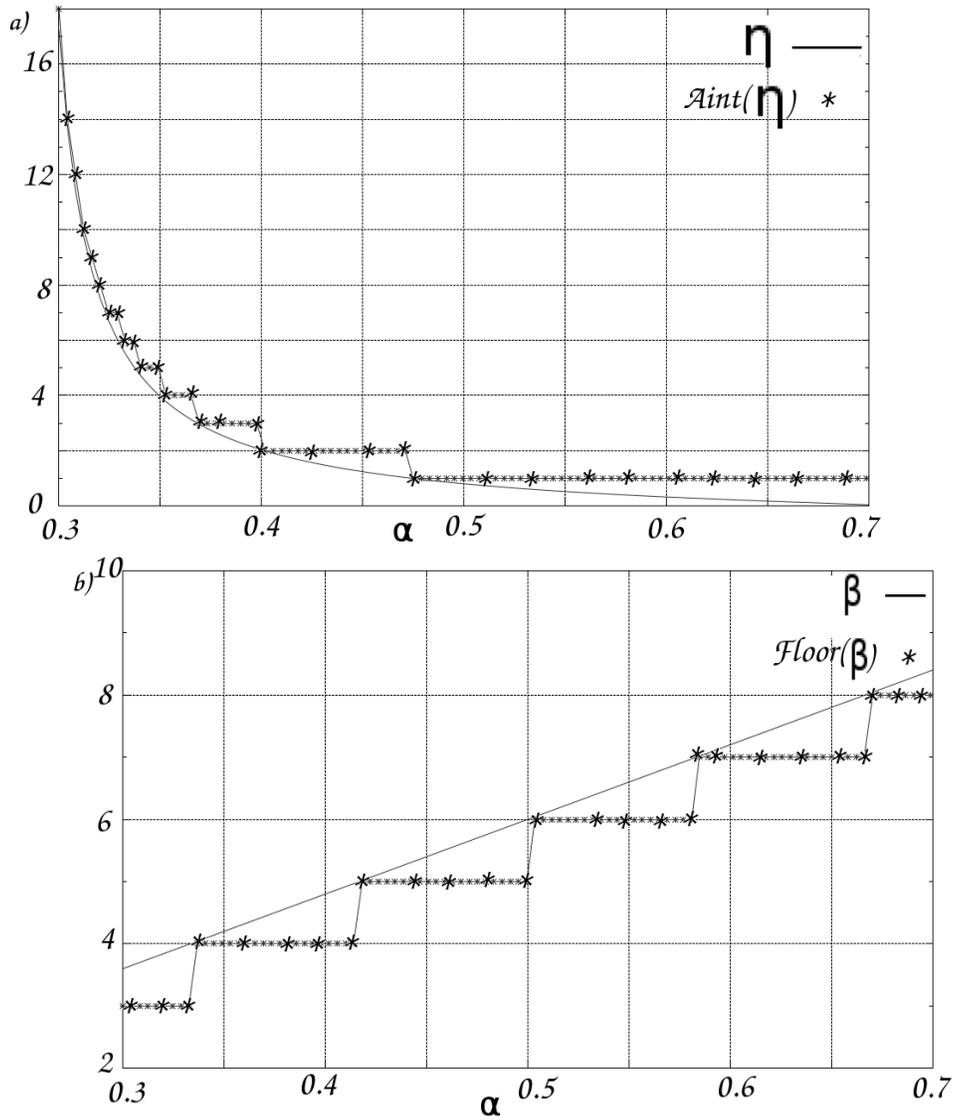


Figura 5.4: Parámetros del campo evanescente incidente con perfil gaussiano en el tiempo y el espacio. a) η (—) Número mínimo de periodos temporales que se deben incluir dentro de σ_t para tener un campo incidente evanescente. $Aint(\eta)$ (*) valor redondeado de η hacia arriba. b) β (—) Número máximo de longitudes de onda que se deben incluir dentro de σ_x para tener un campo incidente evanescente. $Floor(\beta)$ (*) valor redondeado de β hacia abajo

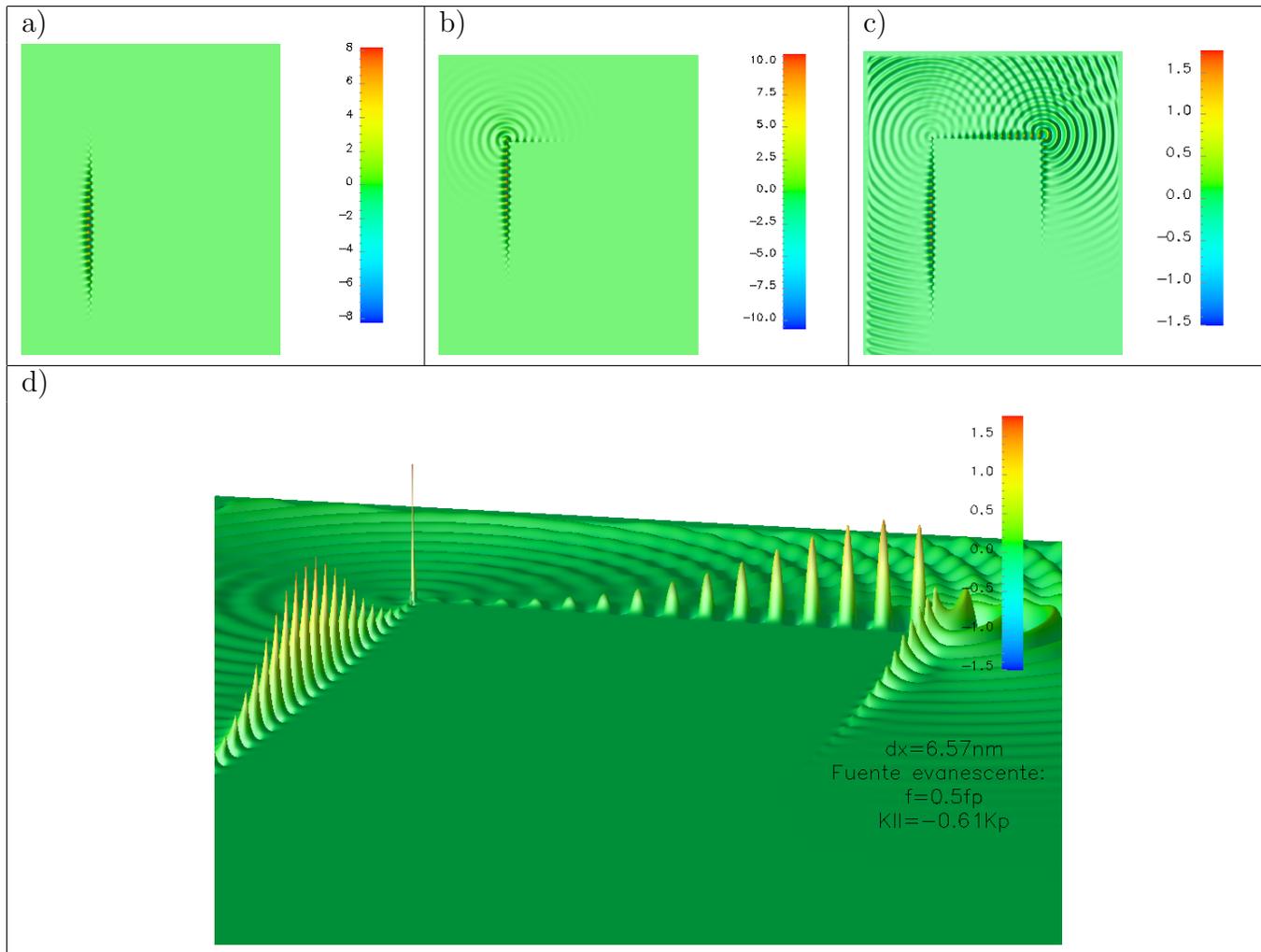


Figura 5.5: Plasmón de superficie excitado con una fuente evanescente con polarización P con $\alpha = 0.5$, $\beta = 5$, $\eta = 2$, $k_{\parallel} = -0.61k_p$ y su máximo en $t_0 = 4\sigma_t$. a) al tiempo $t = t_0$. b) al tiempo $t = 3t_0$ c) al tiempo $t = 7t_0$ d) vista panorámica de c)

Y para su valor central tenemos que:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k_{\parallel}} = 81.7\Delta_s$$

con $\Delta_s = 6.57nm$

y $k_{\parallel} = 0.61k_p$

(5.11)

él cual coincide con el valor medido en la figura 5.6.b Por otro lado, también podemos

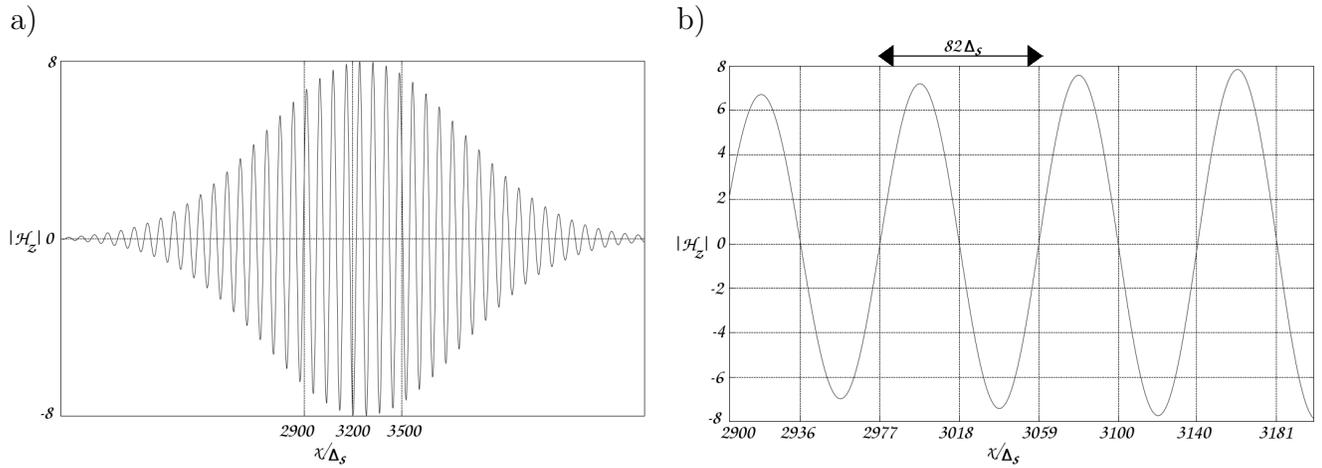


Figura 5.6: Campo H_z a lo largo de la interfaz vacío-metal al tiempo $t = t_0$ y con $\Delta_s = 6.57nm$. a) En todo el largo de la barra. b) Dentro de σ_x

comparar el decaimiento del campo a lo lejos de la interfaz con el fin de comparar las k_{\perp} 's. En la figura 5.7 se muestra el campo normalizado a lo lejos de la interfaz. Se observa que el decaimiento es idéntico dentro del metal lo que sugiere que las k_{\perp} 's son las mismas en los tres lados de la barra a $t = 7t_0$ y por lo tanto del mismo plasmón de superficie.

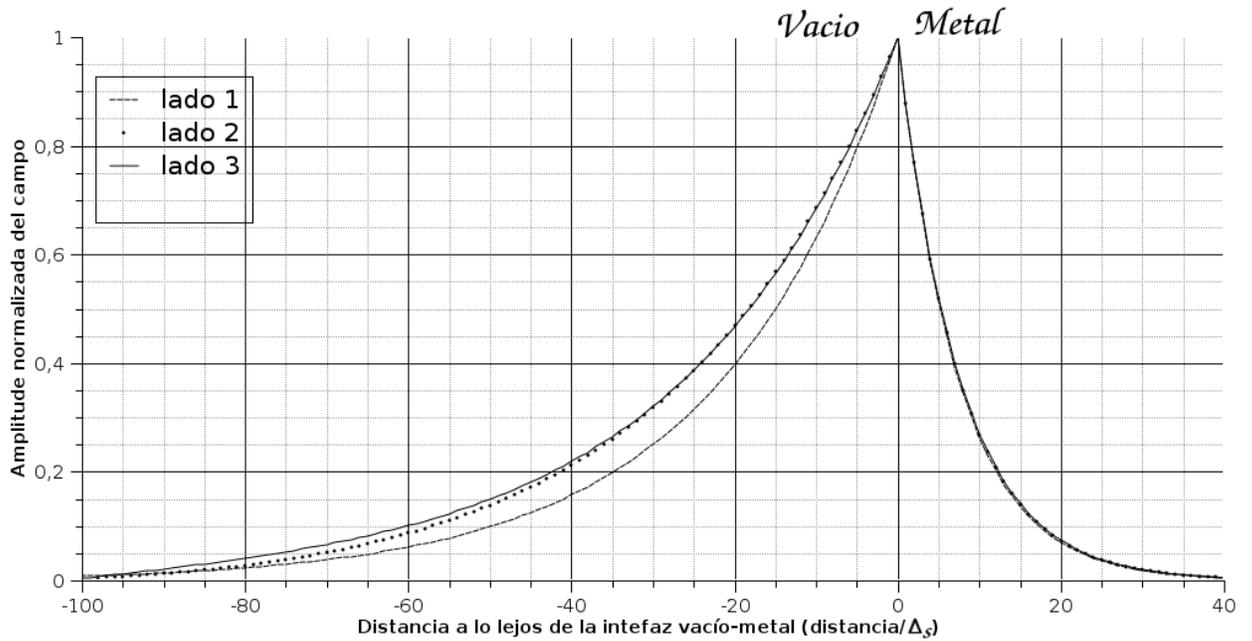


Figura 5.7: Campo normalizado a lo lejos de la interfaz vacío-metal. Los lados de la barra se enumeran en sentido horario empezando con el lado donde incide el campo evanescente.

5.4. Sobre el decaimiento radiativo del plasmón de superficie

Como se vio en la sección 3.6, la parte real de la componente paralela a la interfaz metal-dieléctrico del vector de onda de un plasmón de superficie excede el número de onda propagante del medio dieléctrico. Por lo tanto no es posible que un plasmón de superficie que se propaga a lo largo de una superficie suave y homogénea se transforme en luz a menos que se rompa la simetría traslacional³.

El decaimiento radiativo de un plasmón de superficie es un problema ampliamente estudiado y diverso, ya que la simetría se puede romper de varias formas. Por comentar

³ Se entiende por sistema con simetría traslacional aquel en el que existe una dirección de propagación de la ondas electromagnética, a lo largo de la cual se conserva la sección transversal del sistema, no sólo en geometría sino también en lo que a características electromagnéticas se refiere.

algunos casos tenemos barreras dieléctricas[11], discontinuidades en forma de paso[22] o estructuras periódicas (*gratings*)[23], donde se reporta radiación hacia atrás y hacia adelante (*backscattering* y *forwardscattering*) dependiendo de la geometría de la barrera o defecto. En todos los casos es claramente aceptado que la perturbación a la planicidad aporta un vector de onda paralelo a la superficie que permite acoplar la relación de dispersión del plasmón de superficie con la radiación en el dieléctrico. Así, para una frecuencia dada y definiendo \vec{k}_{sp} como el vector de onda correspondiente al plasmón de superficie, k_{pert} el vector de onda aportado por la perturbación, y k_{\parallel} y k_{\perp} son las componentes paralela y perpendicular a la superficie del vector de la luz en el dieléctrico, el acoplamiento es tal que se debe cumplir:

$$k_{sp} + k_{pert} = k_{\parallel}$$

y el ángulo de emisión lo determina la relación

$$\tan \theta = \frac{k_{\perp}}{k_{\parallel}} \quad (5.12)$$

Donde además se debe cumplir que $k_{\perp}^2 > 0$ y $k_{\perp}^2 + k_{\parallel}^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2$

Mediante el análisis de modos normales, encontramos estudios de refracción[12] y reflexión[13] de plasmones de superficie al hacerlo incidir en una interfaz con otro metal o con un dieléctrico respectivamente. En estos estudios agregan ondas radiativas en la interfaz dado que no es posible empatar por completo las ondas superficiales de un lado al otro.

Existen también algunos trabajos de plasmones de superficie interaccionando con cuñas (*wedges*) de diferentes ángulos incluido el ángulo recto o una esquina[24] como el caso que se estudia en este trabajo tesis. El problema no es nuevo según se puede ver en las referencias de dicho artículo que datan de los años 50 cuando fue desarrollada una teoría por Maluzhinets válida para impedancias pequeñas. También han sido aplicados

métodos puramente numéricos para estudiar la interacción de plasmones de superficie con orillas, como FDTD[15]. En esta referencia estudian la interacción del plasmón de superficie con una esquina redondeada. En particular, estudian el caso de un ángulo recto. Pero en general todo su análisis se hace a frecuencias muy bajas, cerca de la línea de luz del vacío.

Por otro lado, han demostrado que luz confinada en una sonda óptica en un punto con diámetro menor que la longitud de onda de la luz pasada a través de ella (fuente puntual) puede excitar plasmones de superficie de forma selectiva[25].

Con toda esta información en mente podemos bosquejar una teoría que explique como los plasmones de superficie pueden ser desviados en las esquinas del metal. Así pues, se plantea que la fuente puntual generada por el decaimiento radiativo del plasmón incidente (como se muestra en la figura 5.5) genera campo armónico inhomogéneo en su vecindad y este puede generar plasmones de superficie en la interfaz metal-dieléctrico contigua debido a que su amplio espectro en k asociado a su distribución espacial soporta componentes de vector de onda mayores a los propagantes en el dieléctrico.

5.5. Excitación del plasmón de superficie con campo inhomogéneo

Consideremos ahora una fuente puntual con simetría cilíndrica orientada de forma que nos trate de reproducir el patrón de radiación de la figura 5.5.b (el eje del cilindro a lo largo de \hat{z}). Del apéndice E tenemos que el campo magnético fuera de dicha fuente cilíndrica se puede escribir:

$$\vec{H}(\rho, t) = \frac{\vec{H}_0 e^{i\omega_0 t}}{J_0(k_0 R) + iY_0(k_0 R)} H_0^{(1)}(k_0 \rho) \hat{z} \quad (5.13)$$

Donde $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ es el número de onda de la fuente puntual en el espacio libre, $H_0^{(1)}(k_0\rho) = J_0(k\rho) + iY_0(k\rho)$ es la función de Hankel de primer orden y k es la magnitud del vector de onda en el plano xy . Esta fuente se convierte en una fuente puntual cuando $R \ll \lambda$ y se pueden observar líneas de campo inhomogéneo a lo lejos de su eje desde distancias menores a λ , como se muestra en las gráficas de 5.8. Nótese la gran variación del campo al acercarnos al origen de la fuente, el campo es inhomogéneo.

En la 5.9 se muestran los respectivos espectros en k de las distribuciones espaciales de campo de 5.8, donde se muestra que efectivamente la fuente (5.13) contiene componentes de k a lo largo de una superficie suficientes para excitar plasmones de superficie ($\frac{k}{k_0} > 1$).

Ahora, usando el FDTD visto en la sección 4, pondremos una fuente puntual en la vecindad de una interfaz metal-dieléctrico a una distancia de 0.1λ . Esta fuente se definirá de forma que tenga un perfil gaussiano temporal con el fin de hacerla finita y poder capturar el campo sobre la superficie (plasmón de superficie) en ausencia del campo incidente. En la figura 5.10 se muestra una secuencia de cómo evoluciona la amplitud del campo magnético y después de un tiempo $t = 2t_0$, siendo t_0 el tiempo al cual se alcanza la amplitud máxima del perfil gaussiano temporal, se observan dos distribuciones de gran amplitud de campo a lo largo de la interfaz y que decaen exponencialmente a lo lejos de ésta y que tienen una longitud de onda que corresponden a un plasmón de superficie según se ve en la figura 5.11 y en relación de dispersión 3.6. El hecho de ser dos plasmones de superficie está dado por la indeterminación del espectro de la fuente puntual, es decir que el valor absoluto de la componente del vector de onda paralela a la interfaz es la que permite la excitación del plasmón y que el signo de la componente dicta la dirección del plasmón; hacia arriba y hacia abajo como se muestra en la figura 5.10.b.

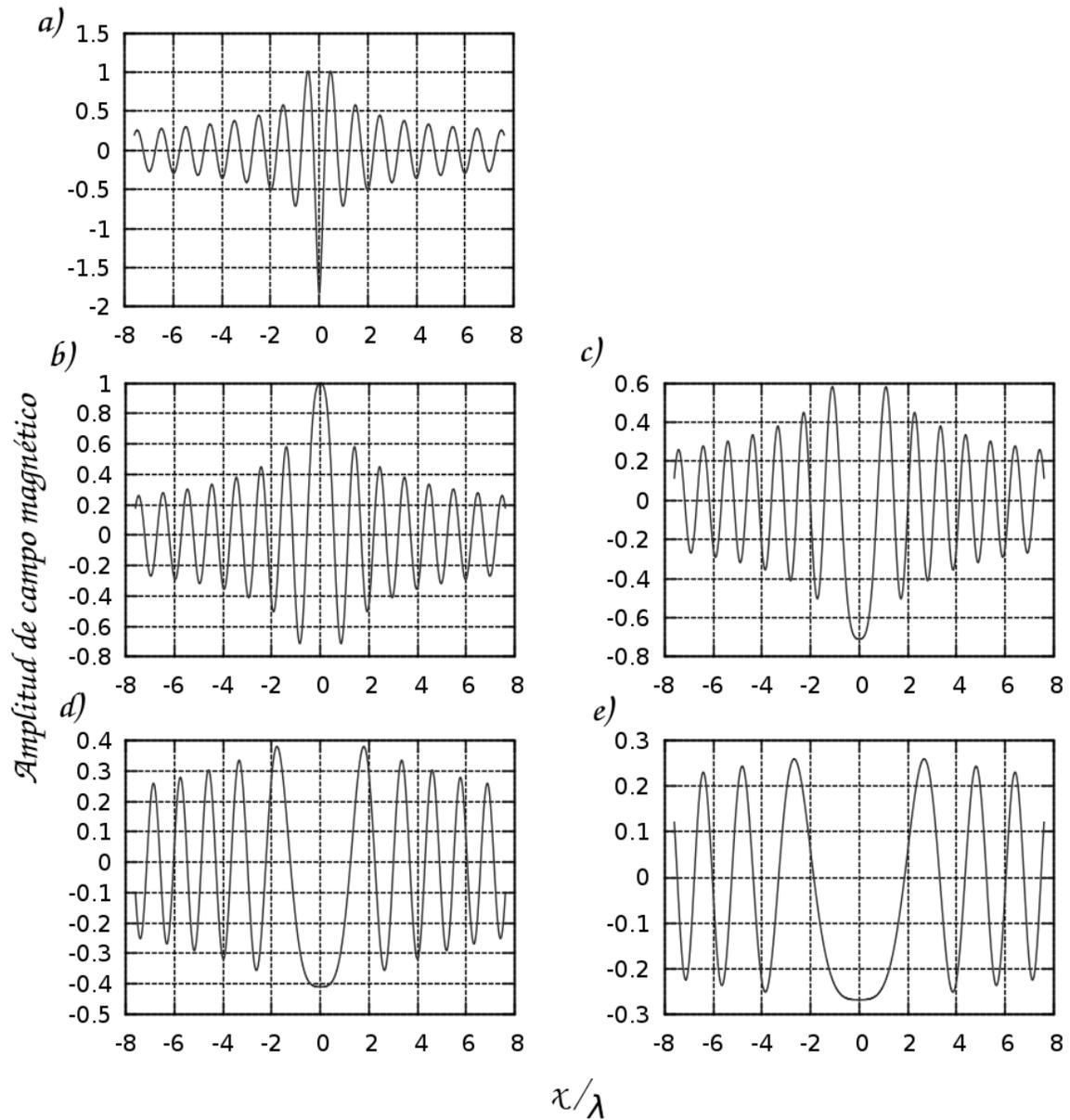


Figura 5.8: Amplitud del campo magnético sobre una superficie imaginaria calculado con (5.13) con $\omega = 0.5\omega_p$, $R = 0.5\lambda$ colocada a una distancia del centro de la fuente de: a) 0.1λ . b) 0.5λ . c) λ . d) 3λ y e) 7λ

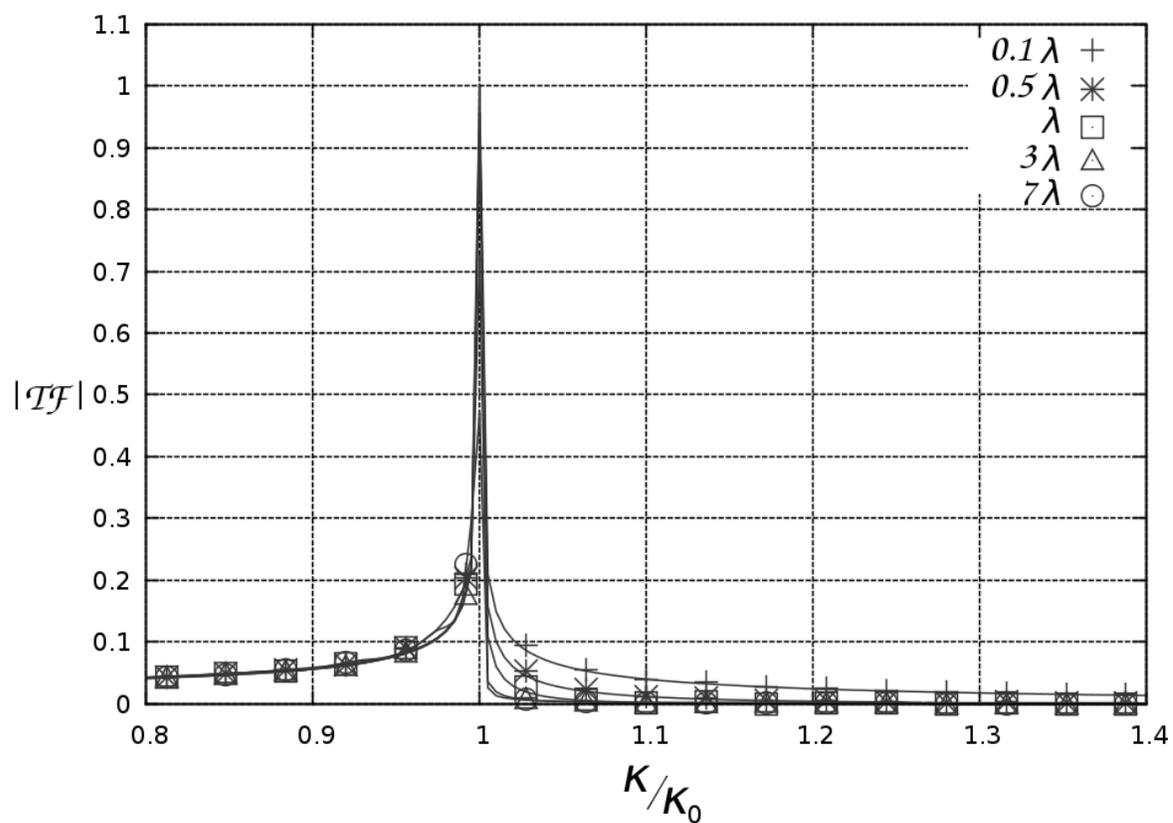


Figura 5.9: Espectros en k normalizados de las distribuciones de campo de 5.8

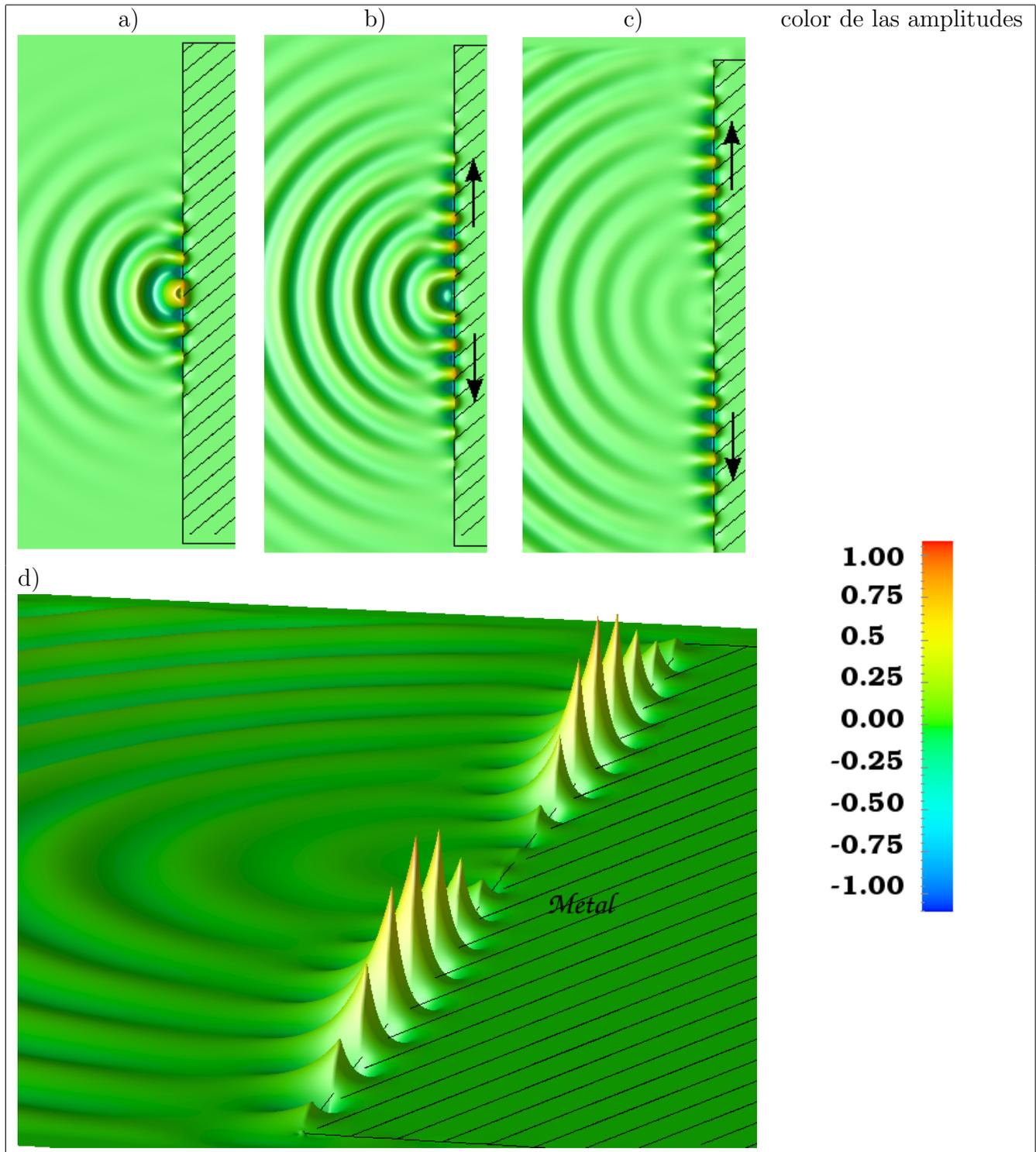


Figura 5.10: Plasmón de superficie excitado con una fuente puntual colocada a 0.1λ de la interfaz metal-dieléctrico con $\omega = 0.5\omega_p$. a) a $t = t_0$. b) a $t = 1.5t_0$. c) a $t = 2t_0$. d) vista panorámica de c)

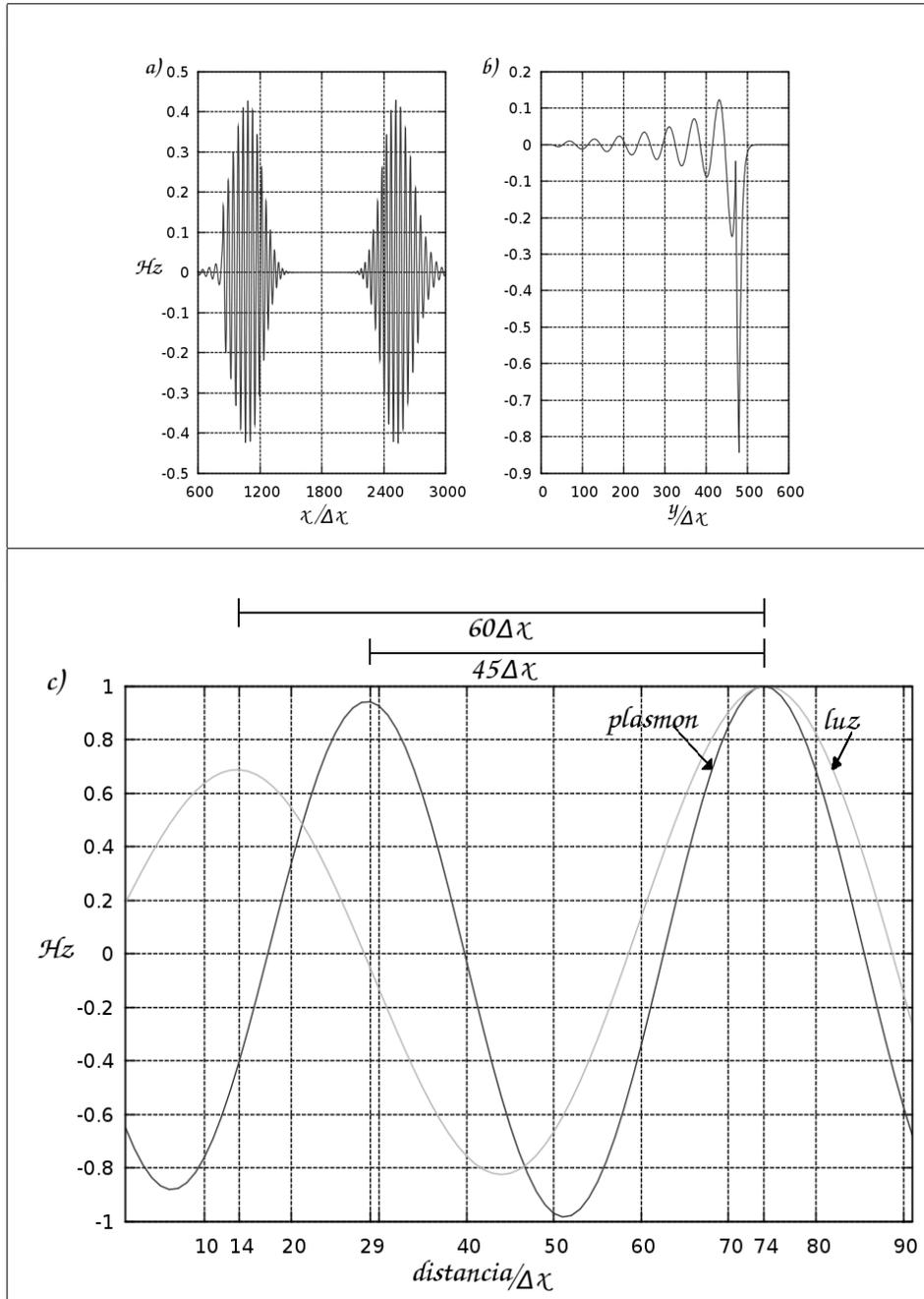


Figura 5.11: Campo magnético: a) a lo largo de la interfaz metal-dieléctrico, b) a lo lejos de ésta y, c) de a) y b) normalizado y desplazado para comparar sus longitudes de onda.

Capítulo 6

Conclusiones

Después de retomar algunos aspectos históricos y físicos sobre el origen de los plasmones de superficie, se desarrollaron programas en fortran aplicando el DFDT en 1D y en 2D para reproducir soluciones analíticas conocidas para problemas ya resueltos con el fin de establecer una validez física para dichos programas desarrollados y sus limitaciones. Por ejemplo, en la sección 4.8.1 (caso para 1D) se encuentran expresiones para obtener el tamaño de partición adecuado según el rango de frecuencias de interés para analizar así como el número de paquetes gaussianos y su respectiva desviación estándar para obtener la respuesta del sistema en estudio en dicho rango de frecuencias.

En el caso de 2D, además de validar un problema muy conocido en la sección 4.8.2, se implementó una novedosa forma de excitar plasmones de superficie con una fuente evanescente en la sección 5.3. La implementación de la fuente evanescente dentro del DFDT esta inspirada por las expresiones de una fuente tipo haz 4.6.3 y de la expresión del campo evanescente 3.3.

Se presenta un interesante efecto reproducido en DFDT donde un plasmón de superficie llega a excitar a otro plasmón de superficie (sección 5.3) y que los dos plasmones (uno reflejado y otro excitado en dirección perpendicular del primero) conservan algunas características del plasmón original, como su decaimiento característico de la parte

imaginaria del k_{\perp} y su longitud de onda. El efecto básico de este fenómeno es la difracción del primer plasmón de superficie al llegar a una esquina del metal por donde se trasladaba y que dicha difracción produce distribuciones de campo inhomogéneo sobre la superficie con componentes en k suficientes para excitar plasmones de superficie.

Apéndice A

Ortogonalidad de los campos \vec{E}, \vec{B} y vector de onda \vec{k}

Con la dirección de propagación arbitraria \hat{n} , el vector de onda toma la forma:

$$\vec{k} = k\hat{n} \quad (\text{A.1})$$

Y los campos tienen la forma general (solución general de (2.14)):

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{X} - \omega t)} \quad (\text{A.2})$$

$$\vec{B} = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{X} - \omega t)} \quad (\text{A.3})$$

Donde \vec{B}_0 y \vec{E}_0 son constantes. Sustituyendo (A.2) en (2.4) con $\rho = 0$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right) \cdot \left(\vec{E}_{0x} \hat{i} + \vec{E}_{0y} \hat{j} + \vec{E}_{0z} \hat{k} \right) e^{i(k_x X + k_y Y + k_z Z)} = 0 \quad (\text{A.4})$$
$$i \left(\vec{E}_0 \cdot \vec{k} \right) e^{\vec{k}\cdot\vec{X}} = 0$$

De donde se puede asegurar que:

$$\vec{E}_0 \cdot \vec{k} = 0 \quad (\text{A.5})$$

y que por lo tanto

$$\boxed{\vec{E} \perp \vec{k}} \quad (\text{A.6})$$

Haciendo algo parecido al sustituir (A.3) en (2.5) obtenemos que:

$$\boxed{\vec{B} \perp \vec{k}} \quad (\text{A.7})$$

Ahora sustituyendo los campos (A.2) y (A.3) en (2.2):

$$\nabla \times \vec{E} = i\omega \vec{B} \quad (\text{A.8})$$

Y por otro lado se tiene que:

$$\nabla \times \vec{E} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = i \left(\vec{k} \times \vec{E} \right) \quad (\text{A.9})$$

Comparando (A.8) con (A.9) podemos ver que:

$$\boxed{\vec{k} \times \vec{E} = \omega \vec{B}} \quad (\text{A.10})$$

Apéndice B

Velocidad de fase

De la ecuación (2.14):

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \left(\frac{1}{\mu} \nabla \times \right) & 0 \\ 0 & \frac{1}{\mu} \nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon} \nabla \times \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix}$$

Si asumimos, por simplicidad, que ϵ y μ son reales y positivos y considerando soluciones armónicas de la forma

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}_0(\vec{x}) e^{i(\vec{K} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{B}_0(\vec{x}) e^{i(\vec{K} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

Entonces la ecuación de onda se reduce a:

$$-\omega^2 \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} = \frac{1}{\epsilon\mu} \begin{pmatrix} \nabla^2 & 0 \\ 0 & \nabla^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Donde se uso la formula vectorial: $\nabla \times (\nabla \times \vec{a}) = \nabla (\nabla \cdot \vec{a}) - \nabla^2 \vec{a}$.

Aplicando el operador $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ en coordenadas cartesianas de (B.1) y reacomodando:

$$(K^2 - \omega\epsilon\mu) \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{B.2})$$

De donde es notable que:

$$K = \omega\sqrt{\epsilon\mu} \quad (\text{B.3})$$

y

$$\frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}} = \nu_p = \frac{\omega}{K} \quad (\text{B.4})$$

Donde ν_p es la velocidad de fase que se define como la tasa a la cual la fase de la onda se propaga en el espacio. y por último tenemos

$$\nu_g = \frac{\partial\omega}{\partial K} \quad (\text{B.5})$$

que es la velocidad de grupo, la cual es la velocidad a la cual se desplaza la envolvente de la onda a través del espacio.

Apéndice C

Función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ para medios absorbentes

Aplicando el rotacional a ambos lados de la ecuación de Maxwell (2.2):

$$\begin{aligned}\nabla \times \nabla \times \vec{E} &= \nabla \times \left(-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) \\ \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} &= -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{H}\end{aligned}\tag{C.1}$$

Por otra parte, se tiene de la ecuación (2.3):

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{H} &= \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \\ &= \sigma \vec{E} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}\end{aligned}\tag{C.2}$$

Sustituyendo la parte derecha de (C.2) en (C.1):

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(\sigma \vec{E} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right)\tag{C.3}$$

Ahora, considerando que la parte temporal del campo es de la forma:

$$\begin{aligned}\vec{E} &\propto e^{-i\omega t} \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} &= -i\omega \vec{E}\end{aligned}\tag{C.4}$$

Sustituyendo en (C.3) nos queda:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \vec{E} &= [\mu_0 \sigma (-i\omega) + \mu_0 \epsilon_0 (-\omega^2)] \vec{E} \\ &= - \left[i\omega \sigma \mu_0 + \frac{\omega^2}{c^2} \right] \vec{E}\end{aligned}\tag{C.5}$$

Del lado izquierdo se tiene que:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \vec{E} &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \vec{E}_0 e^{i(K_x X + K_y Y + K_z Z - \omega t)} \\ \nabla^2 \vec{E} &= - (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) \vec{E}_0 e^{i(K_x X + K_y Y + K_z Z - \omega t)} \\ \nabla^2 \vec{E} &= -K^2 \vec{E}\end{aligned}\tag{C.6}$$

Comparando (C.5) y (C.6):

$$K^2 = \left(\frac{i\sigma}{\omega\epsilon_0} + 1 \right) \frac{\omega^2}{c^2}\tag{C.7}$$

Y dado que $K^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega)$ se identifica que:

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma}{\omega\epsilon_0}\tag{C.8}$$

Apéndice D

Transformada de Fourier

D.1. Teoremas útiles de la transformada de Fourier

Definición:

$$F(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi \quad (\text{D.1})$$

Delta de Dirac:

$$\delta(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi \quad (\text{D.2})$$

y por consiguiente:

$$\delta(\eta - \eta_0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi(\eta - \eta_0)\xi} d\xi \quad (\text{D.3})$$

Teorema de desplazamiento:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi - a) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} f(u) e^{-i2\pi(u+a)\xi} du$$

$$\text{Donde :} \quad u = \xi - a \rightarrow \xi = u + a$$

$$du = d\xi$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi - a) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi = e^{-i2\pi a\xi} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) e^{-i2\pi u\xi} du$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi - a) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi = e^{-i2\pi a\xi} F(\eta) \quad (\text{D.4})$$

Teorema de la modulación:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \sin(2\pi\eta_0\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi &= \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{i2\pi\eta_0\xi} e^{i2\pi\eta\xi} d\xi - \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-i2\pi\eta_0\xi} e^{i2\pi\eta\xi} d\xi \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \sin(2\pi\eta_0\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi &= \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{i2\pi(\eta-\eta_0)\xi} d\xi - \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-i2\pi(\eta+\eta_0)\xi} d\xi\end{aligned}$$

Considerando (D.3) se puede reducir a:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \sin(2\pi\eta_0\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi = \frac{1}{2i} F(\eta - \eta_0) - \frac{1}{2i} F(\eta + \eta_0)} \quad (D.5)$$

Teorema de la convolución:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} [f(\xi) \otimes g(\xi)] e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi') g(\xi - \xi') d\xi' \right] e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi') \left[\int_{-\infty}^{\infty} g(\xi - \xi') e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi \right] d\xi'\end{aligned} \quad (D.6)$$

Por el teorema del desplazamiento (D.4):

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\xi - \xi') e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi = e^{-i2\pi\xi'\eta} G(\eta)$$

Sustituyendo en (D.6):

$$\int_{-\infty}^{\infty} [f(\xi) \otimes g(\xi)] e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi') e^{-i2\pi\xi'\eta} G(\eta) d\xi' \quad (D.7)$$

Y sustituyendo la definición de la transformada de Fourier (D.1) en (D.7) nos queda:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} [f(\xi) \otimes g(\xi)] e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi = F(\eta) G(\eta)} \quad (D.8)$$

Teorema de la derivada:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f'(\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi &= \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\Delta\xi \rightarrow 0} \frac{f(\xi + \Delta\xi) - f(\xi)}{\Delta\xi} e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi \\ &= \lim_{\Delta\xi \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\Delta\xi} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi + \Delta\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi - \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi \right] \right\}\end{aligned} \quad (D.9)$$

Aplicando el teorema del desplazamiento (D.4) a la primera integral del lado derecho de (D.9) y la definición de la transformada a la segunda integral, nos queda:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f'(\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi &= \lim_{\Delta\xi \rightarrow 0} \frac{e^{-i2\pi\eta\Delta\xi} F(\eta) - F(\eta)}{\Delta\xi} \\ &= F(\eta) \lim_{\Delta\xi \rightarrow 0} \left\{ \frac{e^{-i2\pi\eta\Delta\xi} - 1}{\Delta\xi} \right\}\end{aligned} \quad (D.10)$$

Se observa que se puede aplicar la regla de L'Hôpital a este último límite, esta regla dice:

- Dadas dos funciones $f(x)$ y $g(x)$ continuas y derivables en $x = c$, si $f(x)$ y $g(x)$ tienden ambas a cero cuando x tiende a c , entonces el límite cuando x tiende a c del cociente de $f(x)$ y $g(x)$ es igual al límite cuando x tiende a c del cociente de las derivadas de $f(x)$ y $g(x)$. siempre que este límite exista:

$$\lim_{x \rightarrow c} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \rightarrow c} \frac{f'(x)}{g'(x)} \quad (\text{D.11})$$

Aplicando la regla (D.11) y sustituyendo en (D.10) nos queda:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f'(\xi) e^{-i2\pi\eta\xi} d\xi = i2\pi\eta F(\eta)} \quad (\text{D.12})$$

D.2. Transformada de Fourier de un pulso gaussiano

Sea un pulso de forma gaussiana

$$f(t) = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2}$$

y $F(f)$ su transformada de fourier según la definición (D.1):

$$\begin{aligned} F(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2} e^{-i2\pi ft} dt \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2\sigma_t^2}(t^2-2tt_0+t_0^2)-i2\pi ft} dt \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Tomando solo el exponente de e de (D.13) y completando un trinomio cuadrado perfecto:

$$\begin{aligned} t^2 - 2tt_0 + t_0^2 + i4\pi ft\sigma_t^2 &= 0 \\ t^2 - 2t(t_0 - i2\pi f\sigma_t^2) + t_0^2 &= 0 \\ [t - (t_0 - i2\pi f\sigma_t^2)]^2 + t_0^2 - (t_0 - i2\pi f\sigma_t^2)^2 &= 0 \end{aligned}$$

Sustituyendo de vuelta en (D.13):

$$\begin{aligned} F(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2\sigma_t^2} \{ [t - (t_0 - i2\pi f \sigma_t^2)]^2 + t_0^2 - (t_0 - i2\pi f \sigma_t^2)^2 \}} dt \\ &= e^{-\frac{1}{2\sigma_t^2} [t_0^2 - (t_0 - i2\pi f \sigma_t^2)^2]} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2\sigma_t^2} [t - (t_0 - i2\pi f \sigma_t^2)]^2} dt \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

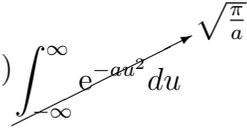
Del primer exponencial de (D.14):

$$\begin{aligned} t_0^2 - (t_0 - i2\pi f \sigma_t^2)^2 &= t_0^2 - t_0^2 + i4\pi \sigma_t^2 f t_0 + i4\pi^2 \sigma_t^4 f^2 \\ &= 4\pi \sigma_t^2 (\pi \sigma_t^2 f^2 + i f t_0) \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

Y haciendo el cambio de variable:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{2\sigma_t^2} \quad u = t - t_0 + i2\pi \sigma_t^2 f \\ du &= dt \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

Sustituyendo (D.15) y (D.16) en (D.14):

$$F(f) = e^{-2\pi(\pi \sigma_t^2 f^2 + i f t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-au^2} du$$


Donde esta última integral es conocida como integral gaussiana la cual tiene un valor bien definido en el intervalo $\pm\infty$ y que, en este caso, según las tablas de integración es de $\frac{\pi}{a}$. Volviendo al valor de a según (D.16), nos queda:

$$\boxed{F(f) = \sigma_t \sqrt{2\pi} e^{-2\pi(\pi \sigma_t^2 f^2 + i f t_0)}} \quad (\text{D.17})$$

Ahora es necesario calcular $|F(f)|$ para quedarnos con una expresión sin parte imaginaria:

$$|F(f)| = [F(f) F^*(f)]^{1/2} \quad (\text{D.18})$$

Donde:

$$F^*(f) = \sigma_t \sqrt{2\pi} e^{-2\pi(\pi \sigma_t^2 f^2 - i f t_0)} \quad (\text{D.19})$$

Sustituyendo (D.19) y (D.17) en (D.18):

$$|F(f)| = \sigma_t \sqrt{2\pi} e^{-2\pi(\pi \sigma_t^2 f^2)} \quad (\text{D.20})$$

Se observa que la amplitud de la transformada de Fourier tiene forma gaussiana, es decir:

$$|F(f)| = \sigma_t \sqrt{2\pi} e^{-2\pi(\pi\sigma_t^2 f^2)} \equiv A e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{f-f_0}{\sigma_f}\right)^2} \quad (\text{D.21})$$

De donde se identifica:

$$A = \sigma_t \sqrt{2\pi}$$

$$f_0 = 0$$

y

$$\boxed{\sigma_f = \frac{1}{2\pi\sigma_t}} \quad (\text{D.22})$$

o bien, en términos de frecuencia angular:

$$\boxed{\sigma_\omega = \frac{1}{\sigma_t}} \quad (\text{D.23})$$

D.3. Transformada de Fourier de un paquete gaussiano

Sea un paquete gaussiano de la forma:

$$f(t) = \sin(2\pi f_0 t) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2} \quad (\text{D.24})$$

y $F(f)$ su transformada de fourier según la definición (D.1):

$$F(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sin(2\pi f_0 t) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2} \right] e^{-i2\pi f t} dt \quad (\text{D.25})$$

Del teorema de la modulación (D.5) y de la transformada de un pulso gaussiano (D.17):

$$\boxed{F(f) = \frac{\sigma_t \sqrt{2\pi}}{2i} e^{-2\pi[\pi\sigma_t^2(f-f_0)^2 + ift_0]} - \frac{\sigma_t \sqrt{2\pi}}{2i} e^{-2\pi[\pi\sigma_t^2(f+f_0)^2 + ift_0]}} \quad (\text{D.26})$$

Para mayor comodidad definimos:

$$F(f - f_0) = \sigma_t \sqrt{2\pi} e^{-2\pi[\pi\sigma_t^2(f-f_0)^2 + ift_0]} \quad (\text{D.27})$$

$$F(f + f_0) = \sigma_t \sqrt{2\pi} e^{-2\pi[\pi\sigma_t^2(f+f_0)^2 + if_0]} \quad (\text{D.28})$$

y sus complejos conjugados:

$$F^*(f - f_0) = \sigma_t \sqrt{2\pi} e^{-2\pi[\pi\sigma_t^2(f-f_0)^2 - if_0]} \quad (\text{D.29})$$

$$F^*(f + f_0) = \sigma_t \sqrt{2\pi} e^{-2\pi[\pi\sigma_t^2(f+f_0)^2 - if_0]} \quad (\text{D.30})$$

De modo que al calcular $|F(f)|^2$ nos quede:

$$|F(f)| = \left[\frac{1}{4} |F(f - f_0)|^2 + \frac{1}{4} |F(f + f_0)|^2 - \frac{1}{4} F(f - f_0) F^*(f + f_0) - \frac{1}{4} F^*(f - f_0) F(f + f_0) \right]^{1/2} \quad (\text{D.31})$$

Y si reescribimos en términos de (D.27)-(D.30) y simplificamos:

$$|F(f)| = \sigma_t \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left\{ \left[e^{-2\pi^2\sigma_t^2(f-f_0)^2} \right]^2 + \left[e^{-2\pi^2\sigma_t^2(f+f_0)^2} \right]^2 - 2 \left[e^{-4\pi^2\sigma_t^2(f^2+f_0^2)} \right]^2 \right\}^{1/2} \quad (\text{D.32})$$

D.4. Transformada de Fourier de $\vec{D}(\omega)$ para medios dispersivos

Partiendo de la relación constitutiva:

$$\vec{D}(\omega) = \epsilon(\omega) \vec{E}(\omega) \quad (\text{D.33})$$

En general:

$$\vec{D}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{D}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (\text{D.34})$$

Y para el caso particular de función dieléctrica de Drude:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{i\omega\gamma} + \frac{\omega_p^2}{i\gamma(\omega + i\gamma)} \quad (\text{D.35})$$

nos queda

$$\vec{D}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 - \frac{\omega_p^2}{i\omega\gamma} + \frac{\omega_p^2}{i\gamma(\omega + i\gamma)} \right] \vec{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

$$\vec{D}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (I_1) \quad -\frac{\omega_p^2}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\vec{E}(\omega)}{i\omega} e^{-i\omega t} d\omega + \frac{\omega_p^2}{i\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\vec{E}(\omega)}{\omega+i\gamma} e^{-i\omega t} d\omega \quad (I_2) \quad (I_3) \quad (D.36)$$

Donde la primera integral es, según la definición de la transformada de Fourier (D.1):

$$I_1 = \vec{E}(t) \quad (D.37)$$

Para la segunda integral, I_2 , definiremos:

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\vec{E}(\omega)}{i\omega} e^{-i\omega t} d\omega = -\frac{\gamma}{\omega_p^2} I_2 \quad (D.38)$$

entonces al calcular $\frac{dF}{dt}$ nos queda

$$\frac{dF}{dt} = - \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega = -\vec{E}(t) \quad (D.39)$$

y si ahora integramos con respecto a t :

$$\frac{\gamma}{\omega_p^2} I_2 = \int_0^t \vec{E}(t') dt' \implies I_2 = \frac{\omega_p^2}{\gamma} \int_0^t \vec{E}(t') dt' \quad (D.40)$$

Y ahora para la integral I_3 se define:

$$I_3 = \frac{\omega_p^2}{i\gamma} \mathcal{TF} \{G(\omega)\} \quad (D.41)$$

donde :

$$G(\omega) = H(\omega) M(\omega)$$

$$H(\omega) = \vec{E}(\omega)$$

$$M(\omega) = \frac{1}{\omega+i\gamma}$$

Del teorema de la convolución (D.8) se tiene:

$$\mathcal{TF} \{G(\omega)\} = h(t) \otimes m(t) \quad (D.42)$$

donde :

$$h(t) = \mathcal{TF} \{H(\omega)\}$$

$$m(t) = \mathcal{TF} \{M(\omega)\}$$

Sustituyendo $H(\omega)$ como se define en (D.41) en la definición de la transformada de Fourier (D.1), $h(t)$ nos queda:

$$h(t) = \vec{E}(t) \quad (D.43)$$

Por otro lado, para la transformada de Fourier de $M(\omega)$ definiremos una integral de contorno, haciendo:

$$\begin{aligned} z &= \omega \\ -z_0 &= i\gamma \\ f(z) &= e^{-izt} \end{aligned} \tag{D.44}$$

De forma que

$$m(t) = \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz = \oint_C \frac{e^{-izt}}{z + i\gamma} dz \tag{D.45}$$

estando definido el contorno C en la figura D.1. Para hacer las integrales a lo largo de dicho contorno es necesario partir la integral (D.45) en dos integrales, una que esté definida a lo largo de la trayectoria C_1 y otra a lo largo de C_2 .

$$m(t) = \int_{C_1} \frac{e^{-izt}}{z + i\gamma} dz + \int_{C_2} \frac{e^{-izt}}{z + i\gamma} dz \tag{D.46}$$

Para la trayectoria C_1 tenemos entonces que:

$$\begin{aligned} z &= r e^{i\theta} \\ \Rightarrow dz &= dr \end{aligned} \tag{D.47}$$

Y para la trayectoria C_2 :

$$\begin{aligned} z &= R_0 e^{i\theta} \\ \Rightarrow dz &= iR_0 e^{i\theta} d\theta \end{aligned} \tag{D.48}$$

Ahora sustituimos (D.47) y (D.48) en (D.46):

$$m(t) = \int_{R_0}^{-R_0} \frac{e^{-irt}}{r + i\gamma} dr + \int_{\pi}^{2\pi} \frac{e^{-iR_0 t e^{i\theta}}}{R_0 e^{i\theta} + i\gamma} iR_0 e^{i\theta} d\theta \tag{D.49}$$

Del la formula integral de Cauchy [26] debemos exigir que z_0 quede dentro del contorno $C = C_1 + C_2$

$$\frac{1}{2\pi} \oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz = f(z_0) \tag{D.50}$$

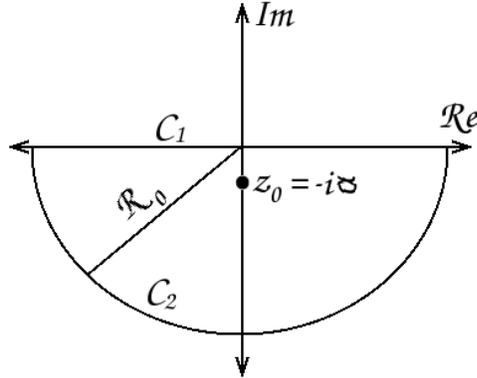


Figura D.1: Contorno de integración de la integral (D.45)

Entonces al hacer tender a infinito el radio del contorno para asegurar que z_0 este dentro de el contorno C :

$$m(t) = \int_{-\infty}^{-\infty} \frac{e^{-irt}}{r + i\gamma} dr + \lim_{R_0 \rightarrow \infty} \int_{\pi}^{2\pi} \frac{e^{-iR_0 t e^{i\theta}}}{R_0 e^{i\theta} + i\gamma} iR_0 e^{i\theta} d\theta \quad (D.51)$$

Donde la segunda integral tiende a cero cuando R_0 tiende a infinito porque e^{-iR_0} decae muy rápido. Por último aplicamos la fórmula (D.50) en (D.51) y nos queda que:

$$m(t) = \int_{\infty}^{-\infty} \frac{e^{-irt}}{r + i\gamma} dr = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-irt}}{r + i\gamma} dr = -2\pi i e^{-\gamma t} \quad (D.52)$$

Sustituyendo (D.43) y (D.52) en (D.42) y después en (D.41), nos queda:

$$I_3 = -2\pi \frac{\omega_p^2}{\gamma} \int_0^t \vec{E}(t') e^{-\gamma(t-t')} dt' \quad (D.53)$$

Y por último sustituimos (D.37), (D.40) y (D.53) en (D.36):

$$\vec{D}(t) = \vec{E}(t) + \frac{\omega_p^2}{\gamma} \int_0^t \vec{E}(t') dt' - 2\pi \frac{\omega_p^2}{\gamma} \int_0^t \vec{E}(t') e^{-\gamma(t-t')} dt' \quad (D.54)$$

Apéndice E

Radiación debida a un cilindro de radio R

Suponemos que en la superficie de un cilindro con radio R tenemos un campo magnético de la forma:

$$\vec{H} = H_0 e^{-i\omega t} \hat{z} \quad (\text{E.1})$$

Considerando la ecuación de onda (2.14) y las consideraciones del apéndice B tenemos que para el vacío hay ondas propagantes con número de onda β :

$$\beta^2 = \mu_0 \epsilon_0 \omega^2 \geq 0 \quad (\text{E.2})$$

Ahora si consideramos la orientación del cilindro de forma que su eje quede paralelo al eje z , quedando definido el plano xy como el plano de incidencia, y resolvemos para \vec{H} suponiendo que el campo tiene polarización TM. entonces podemos escribir el campo \vec{H} en coordenadas cilíndricas al hacer tender la altura del cilindro a infinito:

$$H_z = P(\rho) \theta(\phi) \quad \text{con} \quad \theta(\phi) = e^{im\phi} \quad (\text{E.3})$$

Entonces nos queda por resolver:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(\beta^2 - \frac{m^2}{\rho^2} \right) \right] H_z = 0 \quad (\text{E.4})$$

Donde si reescalamos: $\rho \rightarrow r = \beta\rho$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(1 - \frac{m^2}{r^2} \right) \right] H_z = 0 \quad (\text{E.5})$$

Nos queda la ecuación diferencial de Bessel, la cual tiene como solución general para m enteros:

$$H_z = AJ_m(r) + BY_m(r) \quad (\text{E.6})$$

En particular si $B = iA$, se obtienen las funciones de Hankel de primer tipo de orden m , que describen la propagación de ondas hacia afuera del cilindro. Solo nos interesa con $m = 0$, ya que es la única que satisface la condición de frontera (E.1):

$$H_z = A[J_0(r) + iY_0(r)] \quad (\text{E.7})$$

Aplicando ahora la condición en la frontera (E.1):

$$A[J_0(\beta_0 R) + iY_0(\beta_0 R)] = H_0 e^{-i\omega t} \quad (\text{E.8})$$

Obtenemos que $A = \frac{H_0}{J_0(\beta R) + iY_0(\beta R)} e^{-i\omega t}$

Finalmente obtenemos el campo para cualquier distancia ρ :

$$\boxed{H_z = \frac{H_0}{J_0(\beta R) + iY_0(\beta R)} e^{-i\omega t} [J_0(\beta r) + iY_0(\beta r)]} \quad (\text{E.9})$$

Si acercamos el cilindro a una distancia b de una superficie, el valor del campo superficial (sin considerar la polarización de dicha superficie) lo obtenemos al sustituir $\rho = \sqrt{x^2 + b^2}$, donde b es la distancia de la superficie al centro del cilindro de forma perpendicular y x es la distancia del origen del cilindro a todo lo largo de la superficie.

Bibliografía

- [1] Rashid Zia, Jon A. Achuller, Aun Chandran, and Mark L. Brogersma. Plasmonics: The next chip-scale technology. Materials Today, 9:20–27, July-Agost 2006.
- [2] Editorial. Plasmonics- a vision for the future. Plasmonics, 1:1, april 2006.
- [3] C. H. Gan, G. Bur, and T. D. Visser. A new role for surface plasmon. Optics Photonics News, page 36, December 2007.
- [4] J. B. Pendry, A. J. Holden, W. J. Stewart, and I. Youngs. Extremely low frequency plasmon. Phys. Rev. Lett., pages 4773–4776, 1996.
- [5] W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio, and P. A. Wolff. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. Nature, 391(6668):667–669, 1998.
- [6] L. Aigouy, P. Lalanne, J. P. Hugonin, G. Julié, V. Mathet, and M. Mortier. Near-field analysis of surface waves launched at nanoslits apertures. Phys. Rev. Lett., 98:153902–(1–4), 2007.
- [7] C. Genet and T. W. Ebbesen. Light in tiny holes. Nature, 455:39–46, 2007.
- [8] Stefan A. Maier and Harry A. Atwater. Plasmonics: Localization and guiding of electromagnetic energy in metal/dielectric structures. Journal of Applied Physics, 98:011101–(1–10), 2005.

- [9] R. H. Ritchie. Plasma losses by fast electrons in thin films. Phys. Rev. Lett., 106:874–881, June 1957.
- [10] Dennis M. Sullivan. Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method. IEEE Press Series on RF and Microwave Technology, Wiley–IEEE press, 2000.
- [11] T. P. Shen, R. F. Wallis, A. Maradudin, and G. I. Stegeman. Interference phenomena in the refraction of a surface polariton by vertical dielectric barrier. Appl Opt., 23(4):607–611, February 1984.
- [12] G. I. Stegeman, A. A. Maradudin, and T. S. Rahman. Refraction of a surface polariton by an interface. Phys. Rev. B, 23(6):2576–2584, March 1981.
- [13] R. F. Wallis, A. A. Maradudin, and G. I. Stegeman and. Surface polariton reflection and radiation at end faces. Appl. Phys. Lett., 42(9):764–766, May 1983.
- [14] H. A. Jamid and S. J. Al-Bader. Diffraction of surface plasmon-polaritons in an abruptly terminated dielectric-metal interface. IEE Photonics Technology Letters, 7(3):321–323, March 1995.
- [15] Keisuke Hasegawa, Jens U. Nöckel, and Miriam Deutsch. Curvature-induced radiation of surface plasmon polariton propagating around bends. Phys. Rev. A, 75:063816, 2007.
- [16] Kane Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media. Antennas and Propagation, IEEE Transactions, 14:302–307, 1966.
- [17] A. Taflove. Application of the finite-difference time-domain method to sinusoidal steady state electromagnetic penetration problems. Electromagnetic Compatibility, IEEE Transactions, 22:191–202, 1980.

- [18] J. Manzanares Martínez and J. Gaspar Armenta. Direct integration of the constitutive relations for modeling dispersive metamaterials using the finite difference time-domain technique. Journal of Electromagnetic Waves and Applications, 21(15):2297–2310, 2007.
- [19] A. D. Boardman. Electromagnetics Surface Modes, chapter 4: Optical excitation of surface plasmon-polaritons in layered media, pages 145–148. John Wiley and Sons, 1982.
- [20] Wikipedia. Teorema de muestreo de nyquist-shannon. http://es.wikipedia.org/wiki/Teorema_de_muestreo_de_Nyquist-Shannon.
- [21] H. Raether. Springer Tracts in Modern Physics, pages 1–133. 1998.
- [22] H. A. Jamid and S. J. Al-Bader. Reflection and transmission of surface plasmon mode at a step discontinuity. IEE Photonics Technology Letters, 9(2):220–222, February 1997.
- [23] D. Heitmann and H. Raether. Light emission of nonradiative surface plasmons from sinusoidally modulated silver surfaces. Surface Science, 59(1):17–22, september 1976.
- [24] Vera B. Zon. Reflection, refraction, and transformation into photons of surface plasmons on a metal wedge. J. Opt. Soc. Am. B, 24(8):1960–1967, August 2007.
- [25] B. Hecht, H. Bielefeldt, L. Novotny, Y. Inouye, and D. W. Pohl. Local excitation, scattering, and interference of surface plasmons. Phys. Rev. Lett., 77(9):1889–1892, August 1996.
- [26] George B. Arfken and Hans J. Weber. Mathematical methods for physicists, Fifth edition, chapter 6.4:Cauchy’s Integral Formula, page 411. 2001.