UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS

ESPARCIMIENTO ELECTROMAGNÉTICO POR UNA ESFERA DE RADIO ARBITRARIO

TESIS

Que para obtener el Título de:

FÍSICO

Presenta:

FERNANDA LYZETH RIVERA SALDIVAR

Ensenada, B.C. **Junio del 2009**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

ESPARCIMIENTO ELECTROMAGNÉTICO POR UNA ESFERA DE RADIO ARBITRARIO

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

FERNANDA LYZETH RIVERA SALDIVAR

APROBADO POR:

DR. CLAUDIO ISMAEL VALENCIA YAVES
Presidente del Jurado

DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ
Secretario

DR. JUAN CRISÓSTOMO TAPIA MERCADO
1er. Vocal

A mi mamá, mi tía Yoli y a
mis abuelos Martina y Apolonio.

Agradecimientos

A Dios, porque todo esto fué voluntad de el.

Gracias a mi asesor de tesis Claudio Valencia por su comprensión, infinita paciencia, amistad y por ayudarme a concluir una de las etapas mas importantes de mi vida.

Quiero darle gracias a mi mamá por su apoyo incondicional en todos los sentidos y por hacerme sentir alguien muy especial. A mis abuelos por sus sabios consejos, apoyo y cariño. A Yolanda, porque siendo mi tía también fué como mi hermana y mi mejor amiga. Ustedes son parte del tesoro mas grande que tengo. Gracias papá por darme la vida y por siempre estar pendiente de mi a pesar de la distancia.

A mis amigos de la universidad: Sandra, Juan Carlos, Yunuhen, Adrian (Pixtin), Sol, Kary, Luisa, Gaby, Ochoa, Migue, Angie, Paulo, Jano, Mitrani, Tanahara, Paola, Dulce, Aza, Mayra, Samuel y Riesgo. A mis amigos de los veranos de investigación Tere, Claudia, Mike y Boni. Con ellos me desvelé estudiando, platicando y haciendo nada. Gracias a ustedes la carrera fue muy

amena.

A mis profesores de la facultad y de CICESE que confiaron en mi y siempre me apoyaron.

Y como lo mejor al último, a a mi querido Juan Carlos, quien siempre me apoyó, alentó, y se desveló ayudandome a estudiar. Inicialmente siendo mi mejor amigo y de unos meses para acá haciendo de mis días los más felices de mi vida. Eres tu quien hasta ahora completa el tesoro mas grande de mi vida.

RESUMEN de la tesis que como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física presenta Fernanda Lyzeth Rivera Saldivar. Ensenada, Baja California, México, Junio del 2009.

ESPARCIMIENTO ELECTROMAGNÉTICO POR UNA ESFERA DE RADIO ARBITRARIO

Resumen aprobado por:

DR. CLAUDIO ISMAEL VALENCIA YAVES

Director de tesis

Resumen.

En este trabajo se calculan los coeficientes de extinción y de esparcimiento por una esfera de radio arbitrario, utilizando las bases matemáticas de la teoría de Mie y aproximación dipolar (AD). Se reprodujeron curvas para la eficiencia de extinción producida por el agua, las cuales se encuentran en el libro *Absorption and Scattering of Light by Small Particles de Bohren-Huffman*, pag. 105. Se calcula el esparcimiento para distinto tipo de materiales, como la Ag y el H_2O. Se comparan los resultados del formalismo general para radios arbitrarios respecto del formalismo aproximado que utiliza la AD.

Capítulo 1

Introducción y antecedentes

El esparcimiento ondas electromagnéticas conlleva una gran cantidad de efectos en la materia y son los responsables en gran medida de la apariencia visual que tienen los objetos.

Los distintos enfoques utilizados para analizar este fenómeno dependen de distintos factores, entre ellos la longitud de onda de la radiación incidente y el tamaño del objeto responsable de este esparcimiento. Para el caso de pequeños objetos (tales como átomos, moléculas, etc), una descripción general puede darse en términos de pequeños dipolos oscilantes, los cuales reaccionan cuando sobre ellos incide luz. Por otro lado, cuando la longitud de onda es relativamente pequeña en comparación con el tamaño del blanco, es necesaria una descripción más rigurosa, lo cual en algunos casos suele ser muy complicada, debido a que las soluciones para las ecuaciones de Maxwell dependientes del tiempo sólo se conocen para ciertas geometrías simples tales como la esfera o el cilindro.

El problema del esparcimiento electromagnético por objetos pequeños, al igual que una amplia gama de problemas de la física radica en la solución de ecuaciones diferenciales y la imposición de ciertas condiciones de frontera. Los antecedentes más antiguos y precisos que se conocen sobre el esparcimiento electromagnético por una esfera datan desde 1908 y 1909, en donde Mie [8] y Debye [9] realizan un cálculo de los campos esparcidos. Usualmente en esta clase de problemas sólo es posible obtener una solución numérica, aunque hoy en día debido a la alta capacidad de procesamiento de las computadoras, la complejidad de la descripción de estos fenómenos se ha reducido significativamente. Los métodos rigurosos para resolver el problema

de esparcimiento electromagnético están basados en las ecuaciones de Maxwell y sus condiciones de frontera. Planteamientos básicos, rigurosos y generales sobre la interacción de la radiación electromagnética con la materia pueden encontrarse en [1, 2, 3], enfoques más aplicados a partículas o a sistemas de partículas están muy bien tratados en las referencias [4, 5, 6, 7]. En particular, el presente trabajo está basado en el formalismo que presentan Bohren and Huffman [7] el cual se presenta en el capítulo 4 de este libro, donde estudian aspectos interesantes del esparcimiento electromagnético por una esfera. Cabe destacar que en este caso se pueden obtener soluciones analíticas del problema. El objetivo de este trabajo es desarrollar un formalismo matemático para obtener los coeficientes de esparcimiento y extinción provocados por partículas esféricas de radios arbitrarios. Posteriormente se calcularán los porcentajes de potencia esparcida para partículas de diferentes materiales. A continuación se muestra la distrubución de los capítulos de esta tesis:

En el Capítulo 2 se presenta la teoría de Mie, la cual describe la interacción de una onda plana con una partícula de geometría esférica. Con los cálculos teóricos se obtienen las eficiencias esparcidas y de extinción. En el Capítulo 3 se da la solución del problema utilizando la aproximación dipolar, válida para tamaño de partículas muy pequeñas en comparación con la longitud de onda incidente. En el Capítulo 4 se ilustra la teoría de los Capítulos anteriores mediante la fracción de potencia esparcida para distintos tamaños de esfera y diferentes materiales. Finalmente, en el Capítulo 5, se destacan y analizan los resultados más relevantes del trabajo.

Capítulo 2

Teoría de Mie

La teoría de Mie describe la interacción de una onda plana con una partícula de geometría esférica. Después de resolver la ecuación de onda en coordenadas esféricas se expresan los campos eléctrico y magnético en series infinitas que tienen asociados los polinomios de Legendre y las funciones esféricas de Bessel. A partir de esas expresiones e imponiendo las condiciones de frontera se obtienen los coeficientes de extinsión y esparcimiento.

2.1. Ecuación de Helmholtz

Desde el punto de vista clásico todo fenómeno electromagnético puede describirse mediante las ecuaciones de Maxwell. Cuando se trabaja en regiones libres de fuentes, medios lineales, isótropos y homogéneos (LIH), y cuando los campos tienen dependencia armónica en el tiempo, de dichas ecuaciones podemos escribir:

$$\nabla^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) + \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^2 \epsilon\mu\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \tag{2.1}$$

$$\nabla^2\mathbf{H}(\mathbf{r}) + \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^2 \epsilon\mu\mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0, \tag{2.2}$$

donde $\mathbf{E}$ es el campo eléctrico, $\mathbf{H}$ es el campo magnético, λ la longitud de onda de los campos y c la velocidad de propagación de la luz en el vacío. La característica de los medios materiales está representada por la permitividad eléctrica ϵ y la permeabilidad magnetica μ. Las ecuaciones 2.1 y 2.2 (ecuaciones de Helmholtz) escritas en el Sistema Internacional de unidades (SI), el cual será

utilizado en toda la extensión del trabajo.

2.1.1. Solución general en coordenadas esféricas

Sea $\mathbf{M}$ un vector que se define de la siguiente manera

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\Psi), \tag{2.3}$$

donde $\mathbf{c}$ es un vector constante que se elige de acuerdo a la geometría del objeto y Ψ una función escalar. Poniendo $\mathbf{M}$ en 2.1 o 2.2 tenemos (ver Apéndice A):

$$\nabla^2\mathbf{M} + k^2\mathbf{M} = \nabla \times [\mathbf{c}(\nabla^2\Psi + k^2\Psi)], \tag{2.4}$$

donde $k^2 = (2\pi/\lambda)^2\epsilon\mu$. Por lo tanto $\mathbf{M}$ va a satisfacer la ecuación vectorial de Helmholtz si Ψ satisface la ecuación escalar de Helmholtz:

$$\nabla^2\Psi + k^2\Psi = 0. \tag{2.5}$$

Dado que $\mathbf{M}$ también puede escribirse como $\mathbf{M} = \text{-}\mathbf{c} \times \nabla\Psi$, se verifica que $\mathbf{M}$ es perpendicular a $\mathbf{c}$. A partir de $\mathbf{M}$ construimos otro vector:

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k}, \tag{2.6}$$

donde

$$\nabla \cdot \mathbf{N} = 0, \tag{2.7}$$

$$\nabla^2\mathbf{N} + k^2\mathbf{N} = 0, \tag{2.8}$$

$$\nabla \times \mathbf{N} = k\mathbf{M}. \tag{2.9}$$

Por lo tanto $\mathbf{N}$ y $\mathbf{M}$ tienen las propiedades requeridas de los campos electromagnéticos: satisfacen la ecuación de Helmholtz, su divergencia es cero, el rotacional de $\mathbf{N}$ es proporcional a $\mathbf{M}$ y el rotor de $\mathbf{M}$ es proporcional a $\mathbf{N}$. Entonces el problema de encontrar las soluciones para las ecuaciones de los

campos se reduce a encontrar las soluciones de la ecuación 2.5. Por la simetría esférica del problema se elige a $\mathbf{c}$ como el radio vector $\mathbf{r}$, con esta elección tenemos que

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{r}\Psi). \tag{2.10}$$

La ecuación 2.5 en coordenadas esféricas es

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial \Psi}{\partial r}\Big) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial \Psi}{\partial \theta}\Big) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + k^2\Psi = 0. \tag{2.11}$$

Proponiendo separacion de variables $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ se tiene que

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + m^2\Phi = 0, \tag{2.12}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial \Theta}{\partial \theta}\Big) + \Big[n(n+1) - \frac{m^2}{sin^2\theta}\Big]\Theta = 0, \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\Big) + \Big[k^2r^2 - n(n+1)\Big]R = 0. \tag{2.14}$$

La Ec. 2.12 tiene dos tipos de soluciones, las pares:

$$\Phi_e = \cos m\phi \tag{2.15}$$

y las impares:

$$\Phi_o = \sin m\phi. \tag{2.16}$$

Las soluciones de (2.13) son las funciones de Legendre de primera especie:

$$\Theta(\theta) = P_n^m(\cos\theta) \tag{2.17}$$

.

Haciendo $\rho = kr$ y $Z = R\sqrt{\rho}$ en 2.13

$$\rho\frac{\partial}{\partial \rho}\Big(\rho\frac{\partial Z}{\partial \rho}\Big) + \Big[\rho^2 - (n+\frac{1}{2})^2\Big]Z = 0 \tag{2.18}$$

Las soluciones de 2.18 son las *funciones esféricas de Bessel* $j_n(\rho), y_n(\rho)$ (ver figuras 2.1 y 2.2) , o bien las *funciones esféricas de Hankel*, que se construyen como una combinación lineal de las de Bessel:

$$h_n^{(1)}(\rho) = j_n(\rho) + iy_n(\rho), \tag{2.19}$$

$$h_n^{(2)}(\rho) = j_n(\rho) - iy_n(\rho). \tag{2.20}$$

Si Z_n es cualquiera de las cuatro funciones esféricas de Bessel, entonces la solución para la ecuación de onda escalar es

$$\Psi_{emn} = \cos m\phi P_n^m(\cos\theta) Z_n(kr), \tag{2.21}$$

$$\Psi_{omn} = \sin m\phi P_n^m(\cos\theta) Z_n(kr). \tag{2.22}$$

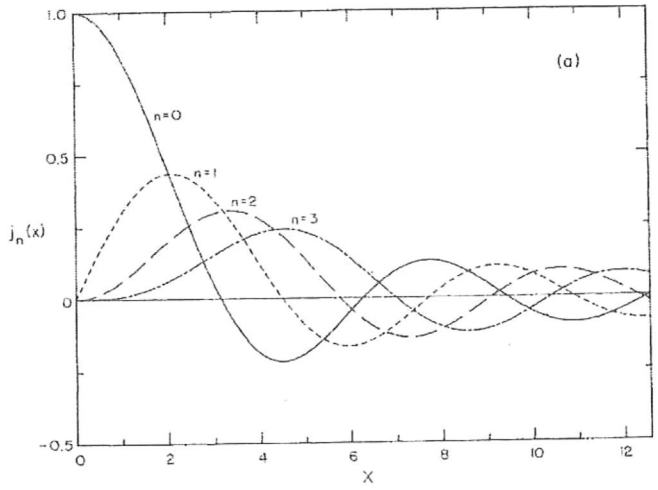

Figura 2.1 Funciones de Bessel esféricas para los órdenes n= 0, 1, 2 y 3.

2.1.2. Vectores Armónicos esféricos

Los vectores armónicos esféricos generados por Ψ_{emn} y Ψ_{omn} son

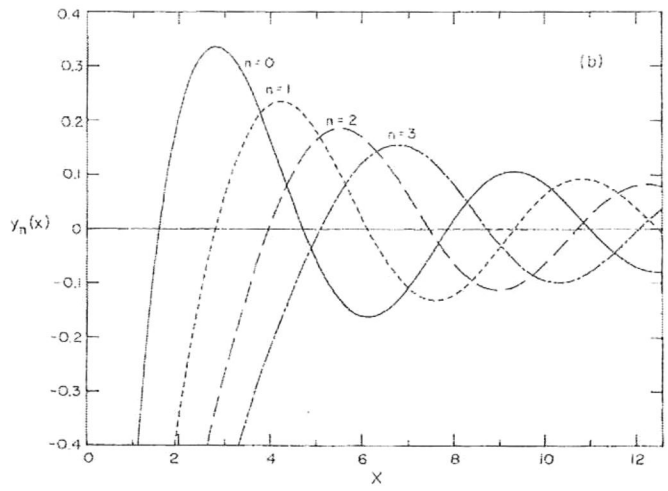

Figura 2.2 Funciones de Bessel modificadas esféricas para órdenes n= 0, 1, 2 y 3.

$$\mathbf{M}_{emn} = \nabla \times (\mathbf{r}\Psi_{emn}), \tag{2.23}$$

$$\mathbf{M}_{omn} = \nabla \times (\mathbf{r}\Psi_{omn}), \tag{2.24}$$

$$\mathbf{N}_{emn} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{emn}}{k}, \tag{2.25}$$

$$\mathbf{N}_{omn} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{omn}}{k}, \tag{2.26}$$

los cuales, se expresan explícitamente como:

$$\mathbf{M}_{emn} = -\frac{m}{\sin\theta} \sin m\phi P_n^m(\cos\theta) z_n(\rho)\mathbf{e}_\theta - \cos m\phi \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta} z_n(\rho)\mathbf{e}_\phi, \tag{2.27}$$

$$\mathbf{M}_{omn} = -\frac{m}{\sin\theta} \cos m\phi P_n^m(\cos\theta) z_n(\rho)\mathbf{e}_\theta - \sin m\phi \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta} z_n(\rho)\mathbf{e}_\phi, \tag{2.28}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{N}_{emn} = \frac{z_n(\rho)}{\rho}\cos m\phi n(n+1)P_n^m(\cos\theta)\mathbf{e}_r \\ + \cos m\phi \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}[\rho z_n(\rho)]\mathbf{e}_\theta \\ -m\sin m\phi \frac{P_n^m(\cos\theta)}{\sin\theta}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}[\rho z_n(\rho)]\mathbf{e}_\phi,\end{aligned} \tag{2.29}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{N}_{omn} = \frac{z_n(\rho)}{\rho}\sin m\phi n(n+1)P_n^m(\cos\theta)\mathbf{e}_r \\ + \sin m\phi \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}[\rho z_n(\rho)]\mathbf{e}_\theta \\ +m\cos m\phi \frac{P_n^m(\cos\theta)}{\sin\theta}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}[\rho z_n(\rho)]\mathbf{e}_\phi.\end{aligned} \tag{2.30}$$

Por lo tanto ya tenemos construída la base de vectores en coordenadas esféricas que se utilizaran en la paróxima sección para expresar el desarrollo de una onda plana en armónicos esféricos.

2.2. Desarrollo de una onda plana en armónicos esféricos

En la Fig.2.3 se representa el campo eléctrico incidente $\mathbf{E}_i$ mediante una onda plana polarizada en $\hat{e}_x$, propagándose en la dirección z:

$$\mathbf{E}_i = E_0 e^{ik\cos\theta}\hat{e}_x. \tag{2.31}$$

Dada la geometría del problema es conveniente escribir el campo incidente en una base de armónicos esféricos,

$$\mathbf{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=m}^{\infty}(B_{emn}\mathbf{M}_{emn} + B_{omn}\mathbf{M}_{omn} + A_{emn}\mathbf{N}_{emn} + A_{omn}\mathbf{N}_{omn}). \tag{2.32}$$

En esta parte vamos a dar un resumen de un procedimiento por demás extenso que finalmente nos conduce a la Ec. 2.43. Detalles más puntuales en el caso de la esfera pueden encontrarse en [7, 3]; por otro lado, detalles más técnicos desde el punto de vista matemático que involucran propiedades de los polinomios de

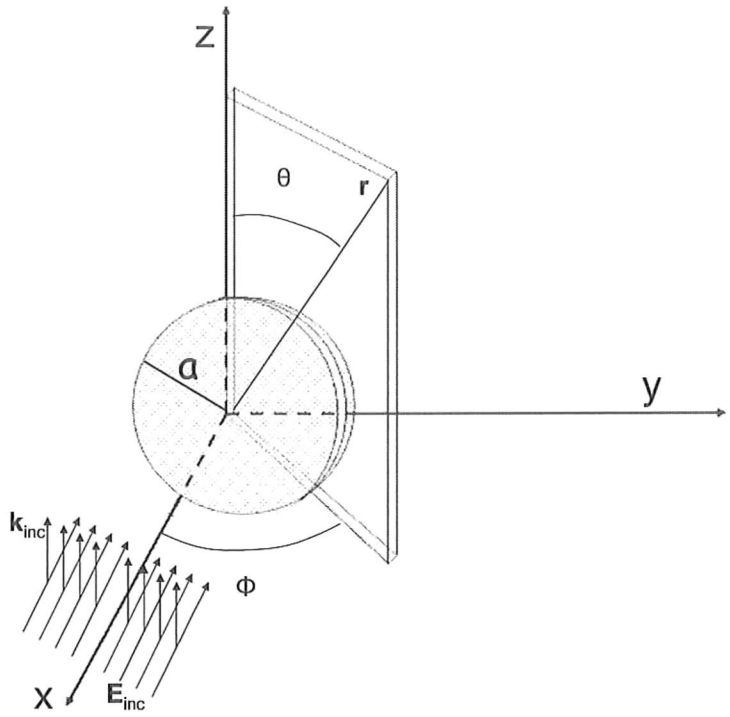

Figura 2.3 Campo incidente polarizado en x con el vector de propagación en z incide sobre una esfera de radio a.

Legendre pueden ser revisados en [13, 14, 15, 16]. Las ecuaciones 2.27-2.28 y las relaciones de ortogonalidad que satisfacen las funciones $\cos m\phi$ y $\sin\phi$, permiten establecer relaciones de ortogonalidad para los vectores armónicos,

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \mathbf{M}_{em'n'} \cdot \mathbf{M}_{omn} \sin\theta d\theta d\phi = 0. \tag{2.33}$$

De manera similar los pares $(\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{N}_{emn})$,$(\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{N}_{omn})$ y $(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{N}_{emn})$ son ortogonales. Utilizando la Ec. 2.13 se puede demostrar la siguiente relación para los polinomios de Legendre:

$$m\int_0^{\pi}\Big(P_n^m \frac{dP_n'^m}{d\theta} + P_n'^m \frac{dP_n^m}{d\theta}\Big)d\theta = P_n^m P_n'^m|_0^{\pi}, \tag{2.34}$$

la cual se anula para todo n y n'. Con este resultado se puede ver que los pares $(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{N}_{omn})$ y $(\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{M}_{omn})$ son también ortogonales. Estas relaciones de

ortogonalidad nos permiten expresar los coeficientes B_{omn} como:

$$B_{omn} = \frac{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{M}_{omn} \sin\theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |\mathbf{M}_{omn}|^2 \sin\theta d\theta d\phi}. \tag{2.35}$$

Similares ecuaciones a esta última se obtienen para los coeficientes B_{omn}, A_{emn} y A_{omn}. Teniendo en cuenta que:

$$\hat{\mathbf{e}}_x = \sin\theta\cos\phi\hat{\mathbf{e}}_r + \cos\theta\cos\phi\hat{\mathbf{e}}_\theta - \sin\phi\hat{\mathbf{e}}_\phi \tag{2.36}$$

y las Ecs. 2.27-2.30 se puede demostrar que $B_{emn} = A_{omn} = 0$ para todo m y n. Utilizando relaciones de ortogonalidad de los polinomios de Legendre se puede demostrar que los coeficientes que quedan desaparecen a menos que m=1, por lo tanto nos queda para el campo incidente la siguiente expresión,

$$\mathbf{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty}(B_{o1n}\mathbf{M}_{oin} + A_{e1n}\mathbf{M}_{e1n}). \tag{2.37}$$

Ahora debemos encontrar el valor de B_{o1n} y A_{e1n}, para esto observamos de (2.13), que los polinomios de Legendre de grado n satisfacen

$$\frac{d}{d\theta}\Big(\sin\theta\frac{dP_n}{d\theta}\Big) = -n(n+1)P_n\sin\theta. \tag{2.38}$$

El numerador de 2.35 contiene una integral del tipo

$$\int_0^{\pi}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta P_n^1)e^{i\rho\cos\theta}d\theta. \tag{2.39}$$

Considerando la representación integral de las funciones esféricas de Bessel:

$$j_n(\rho) = \frac{i^{-n}}{2}\int_0^{\pi} e^{i\rho\cos\theta}P_n\sin\theta d\theta \tag{2.40}$$

se puede demostrar que:

$$B_{o1n} = i^n E_o\frac{2n+1}{n(n+1)}. \tag{2.41}$$

Aunque con un procedimiento bastante más trabajoso, los coeficientes A_{e1n} se obtienen en forma similar, quedando,

$$A_{e1n} = -iE_o i^n\frac{2n+1}{n(n+1)}. \tag{2.42}$$

Entonces el desarrollo del campo incidente en armónicos esféricos se expresa como,

$$\mathbf{E}_i = E_o \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i\mathbf{N}_{e1n}^{(1)}), \tag{2.43}$$

donde el superíndice (1) se le asigna al vector armónico esférico donde la dependencia radial de las funciones generadoras son especificadas por $j_n^{(1)}$.

2.3. Los campos internos y esparcidos

De acuerdo a la ley de Faraday y la Ec. 2.43 podemos obtener el campo magnético incidente:

$$\mathbf{H}_i = -\frac{k}{\mu\omega} E_o \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\mathbf{M}_{e1n}^{(1)} + i\mathbf{N}_{o1n}^{(1)}). \tag{2.44}$$

Es conveniente expresar los campos electromagnéticos esparcidos ($\mathbf{E}_s$,$\mathbf{H}_s$) y los del interior de la esfera ($\mathbf{E}_1$,$\mathbf{H}_1$) en vectores armónicos esféricos. La componente paralela de los campos electromagnéticos (ver fig.2.4) debe ser continua en la superficie de la esfera, esta condición se expresa matemáticamente de la siguiente manera,

$$(\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_s - \mathbf{E}_1) \times \hat{e}_r = (\mathbf{H}_i + \mathbf{H}_s - \mathbf{H}_1) \times \hat{e}_r = 0 \tag{2.45}$$

Las condición de frontera 2.45 y el desarrollo de los campos incidentes dictan la forma de los campos esparcidos e interiores de la esfera:

$$\mathbf{E}_1 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n (c_n \mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i d_n \mathbf{N}_{e1n}^{(1)}), \tag{2.46}$$

$$\mathbf{H}_1 = \frac{-k_1}{\omega\mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (d_n \mathbf{M}_{e1n}^{(1)} + i c_n \mathbf{N}_{o1n}^{(1)}), \tag{2.47}$$

$$\mathbf{E}_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i a_n \mathbf{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \mathbf{M}_{o1n}^{(3)}), \tag{2.48}$$

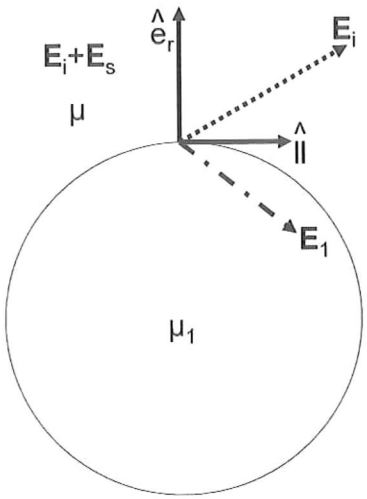

Figura 2.4 Representación de la componente paralela del campo incidente sobre la superficie de la esfera.

$$\mathbf{H}_s = \frac{k}{\omega\mu}\sum_{n=1}^{\infty} E_n(ib_n\mathbf{N}_{o1n}^{(3)} + a_n\mathbf{M}_{e1n}^{(3)}), \tag{2.49}$$

donde $E_n = (2n+1)/n(n+1)$ y μ_1 es la permeabilidad de la esfera. El superíndice (3) se le asigna al vector esférico armónico para el cual la dependencia radial de las funciones generadoras son especificadas por $h_n^{(1)}$.

2.3.1. Coeficientes de esparcimiento

Para realizar los cálculos de esparcimiento o absorción necesitamos obtener las expresiones de los coeficientes a_n, b_n, c_n y d_n. Las ecuaciones requeridas para hallar estos coeficientes se obtienen de la continuidad de los campos en la frontera:

$$
\begin{aligned}
E_{i\theta} + E_{s\theta} &= E_{1\theta}, \\
E_{i\phi} + E_{s\phi} &= E_{1\phi}, \\
H_{i\theta} + H_{s\theta} &= H_{1\theta}, \\
H_{i\phi} + H_{s\phi} &= H_{1\phi}.
\end{aligned} \tag{2.50}
$$

Realizando un poco de álgebra se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$
\begin{aligned}
j_n(mx)c_n + h_{(1)}(x)b_n &= j_n(x), \\
\mu[mxj_n(mx)]'c_n + \mu_1[xh_n^{(1)}(x)]'b_n &= \mu_1[xj_n(x)]', \\
\mu m j_n(mx)d_n + \mu_1 h_{(1)}(x)a_n &= \mu j_n(x), \\
\big[mxj_n(mx)\big]'d_n + m[xh_n^{(1)}(x)]'a_n &= m[xj_n(x)]',
\end{aligned} \tag{2.51}
$$

donde la prima indica la diferenciación respecto al argumento entre paréntesis, $x = ka = \dfrac{2\pi Na}{\lambda}$ y $m = \dfrac{k_1}{k} = \dfrac{N_1}{N}$. N_1 y N son los índices de refracción de la partícula y del medio respectivamente. Resolviendo el sistema de ecuaciones se obtienen las siguientes expresiones para los coeficientes a_n, b_n, c_n y d_n:

$$
c_n = \frac{\mu_1 j_n(x)\big[xh_n^{(1)}(x)\big]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x)\big[xj_n(x)\big]'}{\mu_1 j_n(mx)\big[xh_n^{(1)}(x)\big]' - \mu h_n^{(1)}(x)\big[mxj_n(mx)\big]'} \tag{2.52}
$$

$$
d_n = \frac{\mu_1 m j_n(x)\big[xh_n^{(1)}(x)\big]' - \mu_1 m h_n^{(1)}(x)\big[xj_n(x)\big]'}{\mu m^2 j_n(mx)\big[xh_n^{(1)}(x)\big]' - \mu h_n^{(1)}(x)\big[mxj_n(mx)\big]'} \tag{2.53}
$$

$$
a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx)\big[xj_n^{(1)}(x)\big]' - \mu_1 j_n(x)\big[mxj_n(x)\big]'}{\mu m^2 j_n(mx)\big[xh_n^{(1)}(x)\big]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x)\big[mxj_n(mx)\big]'} \tag{2.54}
$$

$$
b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx)\big[xj_n(x)\big]' - \mu j_n(x)\big[mxj_n(mx)\big]'}{\mu_1 j_n(mx)\big[xh_n^{(1)}(x)\big]' - \mu h_n^{(1)}(x)\big[mxj_n(mx)\big]'} \tag{2.55}
$$

Si tomamos una n tal que la longitud de onda λ o el radio a producen denominadores muy pequeños, el modo a_n por ejemplo, será dominante, cumpliéndose la relación

$$\frac{[xh_n^{(1)}(x)]'}{h_n^{(1)}(x)} = \frac{\mu_1[mxj_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx)}. \tag{2.56}$$

Análogamente tendremos para el coeficiente b_n,

$$\frac{[xh_n^{(1)}(x)]'}{h_n^{(1)}(x)} = \frac{\mu_1[mxj_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx)}. \tag{2.57}$$

Las longitudes de onda (o frecuencias) que satisfacen las Ecs. 2.56 y 2.57 se denominan longitudes de onda (o frecuencias) naturales de la esfera.

2.3.2. Sección transversal

El campo esparcido para un haz de luz incidente arbitrario y polarizado, se obtiene por la simetría de la partícula. Por ejemplo, los campos esparcidos de igual amplitud incidente x-polarizada e y-polarizada en el plano son

$$\mathbf{E}_s(\phi; x - polarizada) = \mathbf{E}_s(\phi + \frac{\pi}{2}; y - polarizada).$$

Si tenemos los coeficientes de esparcimiento a_n y b_n se pueden determinar todas las cantidades medibles asociadas con el esparcimiento y absorción, tal como la eficiencia esparcida.

2.3.3. Coeficientes de esparcimiento y de extinción

El contenido energético de la onda electromagnética incidente se distribuye en energía esparcida y absorbida. Desde el punto de vista matemático es conveniente trabajar con el vector de Poyting para poder acercar el modelo físico que se plantea a situaciones de interés experimental. Por ejemplo el vector de Poynting $\mathbf{S}$ en cualquier punto de un medio que rodea a la partícula [7] se puede escribir como la suma de tres términos

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} Re\{\mathbf{E}_2 \times \mathbf{H}_2^*\} = \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_s + \mathbf{S}_{ext}, \tag{2.58}$$

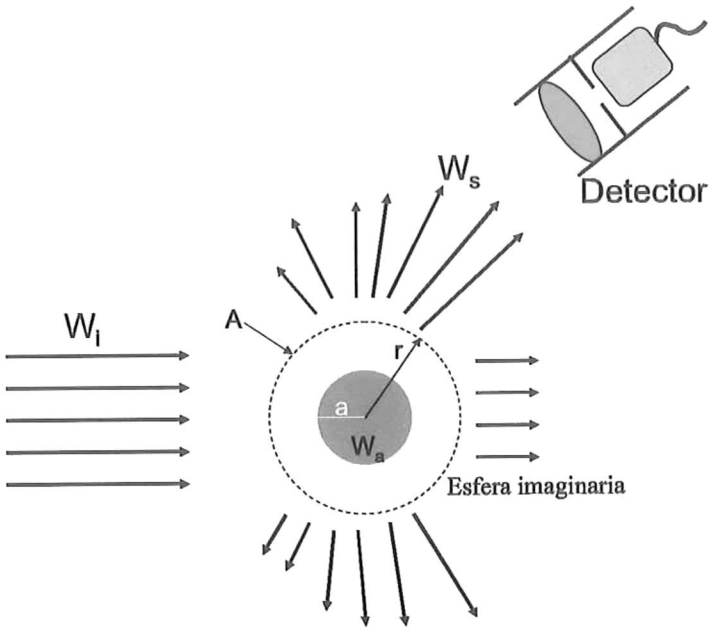

Figura 2.5 Un detector ubicado a una distancia r de la partícula recibe la potencia esparcida por esta.

donde $\mathbf{S}_i$, $\mathbf{S}_s$ y $\mathbf{S}_{ext}$ representan los vectores de Poynting de la radiación incidente, esparcida y extinguida respectivamente. Si el medio es no absorbente, esto quiere decir que sólamente la partícula absorbe parte de la enegıá incidente. En este caso la potencia absorbida por la partícula (ver Fig. 2.5) puede calcularse como,

$$W_a = -\int_A \mathbf{S} \cdot \hat{e}_r dA. \tag{2.59}$$

Las expresiones de la potencia incidente y esparcida son:

$$W_i = -\int_A \mathbf{S}_i \cdot \hat{e}_r dA, W_s = \int_A \mathbf{S}_s \cdot \hat{e}_r dA. \tag{2.60}$$

Lo que se pierde en esparcimiento y absorción suele llamarse *extinción*:

$$W_{ext} = W_a + W_s. \tag{2.61}$$

Calculando esta cantidad a través de la superficie esférica de radio r de la Fig. 2.5, tenemos que:

$$W_{ext} = \frac{1}{2} Re \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (E_{i\phi} H_{s\theta}^* - E_{s\theta} H_{i\phi}^* + E_{s\theta} H_{i\theta}^*) r^2 \sin\theta d\theta d\phi,$$
$$W_s = \frac{1}{2} Re \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (E_{s\theta} H_{s\phi}^* - E_{s\phi} H_{s\theta}^*) r^2 \sin\theta d\theta d\phi, \qquad (2.62)$$

donde el radio $r \geq a$ de las esfera imaginaria es arbitrario. Sabemos que W_{ext} y W_s son independientes del estado de polarización de la luz incidente. Por lo tanto, evaluando las integrales 2.62 podemos tomar la luz incidente y polarizarla en x:

$$E_{i\theta} = \frac{\cos\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (\psi_n \pi_n - i\psi_n' \tau_n),$$
$$H_{i\theta} = \frac{k}{\omega\mu} \tan\phi E_{i\theta},$$
$$E_{i\phi} = \frac{\sin\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i\psi_n' \pi_n - \psi_n \tau_n),$$
$$H_{i\phi} = \frac{-k}{\omega\mu} \cot\phi E_{i\phi}, \qquad (2.63)$$

donde $\rho = kr$, $\psi_n = \rho j_n(\rho)$,$\pi_n = \dfrac{P_n^1}{\sin\theta}$ y $\tau_n = \dfrac{dP_n^1}{d\theta}$. El campo esparcido correspondiente es

$$E_{s\theta} = \frac{\cos\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i a_n \xi_n' \pi_n - b_n \xi_n \pi_n),$$
$$E_{s\phi} = \frac{\sin\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (b_n \xi_n \tau_n - i a_n \xi_n' \pi_n),$$
$$H_{s\theta} = \frac{k}{\omega\mu} \frac{\cos\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i b_n \xi_n' \tau_n - a_n \xi_n \pi_n),$$
$$H_{s\phi} = \frac{k}{\omega\mu} \frac{\cos\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i b_n \xi_n' \pi_n - a_n \xi_n \tau_n), \qquad (2.64)$$

donde $\xi_n = \rho h_n^{(1)}(\rho)$.

Si suponemos que los desarrollos en serie 2.64 pueden ser sustituídos en la integral por W_s y las series resultantes se integran término por término, obtenemos

$$W_s = \frac{\pi |E_0|^2}{k\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)\ \Re(g_n)(|a_n|^2 + |b_n|^2), \tag{2.65}$$

donde hemos usado 2.34 y

$$\int_0^{\pi} (\pi_n \pi_m + \tau_n \tau_m) sin\theta d\theta = \delta_{nm} \frac{2n^2(n+1)^2}{2n+1},$$

donde $g_n = -i\xi_n^* \xi_n'$, se puede escribir de la forma

$$g_n = (\chi_n^* \psi_n' - \psi_n^* \chi_n') - i(\psi_n^* \psi_n' - \chi_n^* \chi\prime_n),$$

donde $\chi_n = -\rho y_n(\rho)$ es la *función de Riccati-Bessel* y por lo tanto $\xi_n = \psi_n - i\chi_n$.

Se define a la *eficiencia esparcida* Q_{sca} como la fracción de potencia esparcida respecto a la potencia indicente. Entonces, utilizando la relación $\chi_n \psi_n' - \psi_n \chi_n' = 1$ [13, 14] tenemos que:

$$Q_{sca} = \frac{W_s}{W_i} = \frac{2}{(ka)^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2). \tag{2.66}$$

Similarmente, la eficiencia extinguida queda en la forma,

$$Q_{ext} = \frac{W_{ext}}{W_i} = \frac{2}{(ka)^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) Re(a_n + b_n). \tag{2.67}$$

Capítulo 3

Aproximción electrostática

Cuando el radio de la esfera es muy pequeño en comparación con la longitud de onda incidente, la aproximación dipolar ofrece una solución para el problema de esparcimiento electromagnético. Por lo que en esta parte se piensa en el problema de la esfera como el equivalente a tener dos cargas puntuales q y -q separadas por una distancia d. Se toma el caso en el límite donde d tiende a cero para tener la configuración llamada dipolo.

3.1. Cálculo dipolar

El dipolo eléctrico consiste en un sistema de dos cargas cercanas entre si de igual magnitud y signo opuesto. Un dipolo eléctrico se genera aplicando un campo eléctrico a un material dieléctrico. El momento dipolar se define como una magnitud vectorial con módulo igual a la carga q por la distancia d que las separa.

$$\mathbf{p} = q\mathbf{d}. \tag{3.1}$$

Cuando el radio de la esfera es muy pequeño en comparación con la longitud de onda incidente, la aproximación dipolar nos ofrece una solución para el problema de esparcimiento electromagnético. Considérese una esfera LIH que se encuentra en un medio arbitrario donde existe un campo eléctrico uniforme $\mathbf{E}_0 = E_0\hat{\mathbf{e}}_z$. Si las permitividades de la esfera y el medio son distintas, una carga será inducida en la superficie de la esfera. La presencia de la esfera distorcionará el campo uniforme inicial. Los campos eléctricos dentro y fuera

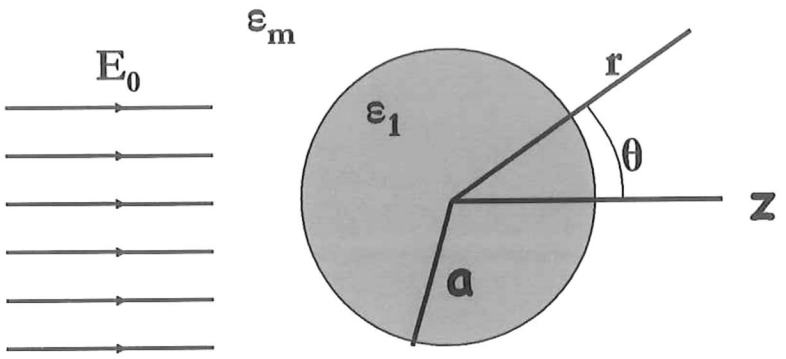

Figura 3.1 Esfera dieléctrica en un campo uniforme.

de la esfera $\mathbf{E}_1$ y $\mathbf{E}_2$, respectivamente se derivan de los potenciales escalares $\Phi_1(r,\theta)$ y $\Phi_2(r,\theta)$:

$$\mathbf{E}_1 = -\nabla\Phi_1, \qquad \mathbf{E}_2 = -\nabla\Phi_2, \tag{3.2}$$

donde,

$$\nabla^2\Phi_1 = 0 \quad (r < a), \qquad \nabla^2\Phi_2 = 0 \quad (r > a). \tag{3.3}$$

Por la simetría del problema, los potenciales son independientes del ángulo azimutal ϕ. En la frontera los potenciales deben satisfacer

$$\Phi_1 = \Phi_2, \qquad \varepsilon_1\frac{\partial\Phi_1}{\partial r} = \varepsilon_m\frac{\partial\Phi_2}{\partial r} \quad (r = a). \tag{3.4}$$

La condición de frontera en el infinito nos da:

$$\lim_{r\to\infty} \Phi_2 = -E_0 r\cos\theta = -E_0 z, \tag{3.5}$$

que nos dice que a distancias grandes respecto de la esfera, el campo eléctrico aplicado no es perturbado. Las siguientes funciones satisfacen las ecuaciones diferenciales parciales y las condiciones de frontera de la esfera.

$$\Phi_1 = -\frac{3\varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m} E_0 r\cos\theta,$$

$$\Phi_2 = -E_0 r\cos\theta + a^3 E_0 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m}\frac{\cos\theta}{r^2}, \tag{3.6}$$

donde ε_1 y ε_m representan las permitividades de la esfera y del medio que la rodea respectivamente. Pensemos en un problema equivalente de tener dos cargas puntuales q y $-q$ separadas por una distancia d. En el límite de d tendiendo a cero tenemos una configuración llamada *dipolo* con *momento dipolar* $\mathbf{p}=p\mathbf{e}_z$, donde $p=qd$. Si las cargas están dentro de un medio uniforme sin límites con permeabilidad ε_m, el potencial Φ del dipolo en cualquier punto P es

$$\Phi = \frac{q}{4\pi\varepsilon_m}\left(\frac{1}{r_+} - \frac{1}{r_-}\right), \tag{3.7}$$

$$r_+ = r\left(1 - \frac{\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{e}}_z}{r^2}d + \frac{d^2}{4r^2}\right)^{1/2}, \quad r_- = r\left(1 + \frac{\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{e}}_z}{r^2}d + \frac{d^2}{4r^2}\right)^{1/2}. \tag{3.8}$$

Tomando el límite de d tendiendo a cero obtenemos el potencial de un dipolo

$$\Phi = \frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{4\pi\varepsilon_m r^3} = \frac{p\cos\theta}{4\pi\varepsilon_m r^2}. \tag{3.9}$$

Volviendo al problema de la esfera en un campo uniforme, notamos de 3.6 y de 3.9 que el campo fuera de la esfera es la superposición del campo exterior uniforme y el campo del dipolo con momento dipolar respecto del origen:

$$\mathbf{p} = 4\pi\varepsilon_m a^3 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m}\mathbf{E}_0. \tag{3.10}$$

La cantidad $(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)/(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m)$ sugiere una conexión entre electrostática y el esparcimiento por pequeñas partículas comparadas con la longitud de onda. El campo eléctrico aplicado induce un momento dipolar proporcional al campo. La esfera está polarizada y puede ser especificada por la polarizabilidad α que esta definida por

$$\mathbf{p} = \varepsilon_m \alpha \mathbf{E}_0,$$

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m} \tag{3.11}$$

Estamos interesados en poblemas de esparcimiento donde el campo incidente es una onda plana que varía en tiempo y espacio. Reemplazaremos la esfera por un dipolo ideal con momento dipolar $\varepsilon_m \alpha \mathbf{E}_0$ incluso cuando el campo incidente es una onda plana. El momento dipolar $\mathbf{p} = \varepsilon_m \alpha E_0 e^{-i\omega t}\hat{\mathbf{e}}_x$ de un dipolo ideal, localizado en z=0 e iluminado por una onda plana polarizada en x $E_0 exp(ikz - i\omega t)\hat{\mathbf{e}}_x$, oscila con la frecuencia del campo aplicado, por lo tanto el dipolo radia un campo eléctrico [3]:

$$\mathbf{E}_s = \frac{e^{ikr}}{-ikr} \frac{ik^3}{4\pi\varepsilon_m} \hat{\mathbf{e}}_r \times (\hat{\mathbf{e}}_r \times \mathbf{p}), \qquad (kr >> 1) \tag{3.12}$$

donde se ha omitido el factor de dependencia temporal $e^{-i\omega t}$. Después de algunos cálculos 3.12 se puede poner de la forma

$$\mathbf{E}_s = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \mathbf{X} E, \qquad E = E_0 e^{ikz}, \tag{3.13}$$

donde

$$\mathbf{X} = \frac{ik^3}{4\pi} \alpha \hat{\mathbf{e}}_r \times (\hat{\mathbf{e}}_r \times \hat{\mathbf{e}}_x). \tag{3.14}$$

Las eficiencias de la extinción y esparcimiento son

$$Q_{ext} = \frac{W_{ext}}{W_i} = \frac{4}{(ka)^2} Re\{(\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_x)_{\theta=0}\}, \tag{3.15}$$

y

$$Q_{sca} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{|\mathbf{X}|^2}{\pi(ka)^2} \sin\theta d\theta d\phi = \int_{4\pi} \frac{|\mathbf{X}|^2}{\pi(ka)^2} d\Omega \tag{3.16}$$

(p. 71 de [7]) quedando:

$$Q_{ext} = \frac{k}{\pi a^2} Im\{\alpha\} = 4xIm\left\{\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m}\right\} \tag{3.17}$$

$$Q_{sca} = \frac{k^4}{6\pi^2 a^2}|\alpha|^2 = \frac{8}{3}x^4\left|\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m}\right|^2. \tag{3.18}$$

La eficiencia absorbida $Q_{abs} = Q_{ext}$ solo si el esparcimiento es pequeño comparado con la absorción.

Capítulo 4

Resultados

En este Capítulo se dan ejemplos de la teoría presentada en los Capítulos 2 y 3 para diferentes materiales: H_2O, Ag y Au. Se discuten criterios de convergencia para darle un caracter finito a la suma infinita de funciones de Bessel. Se compararon resultados de nuestra implementación numérica con los datos de la implementación numérica usada en [7]. En el caso de radios pequeños se compara el método riguroso (Teoría de Mie) con el de la aproximación dipolar.

4.1. Resultados para H_2O

Para poder ilustrar la teoría presentada en el capítulo 2 necesitamos evaluar los coeficientes de esparcimiento y de extinción expresados según las Ecs. 2.66 y 2.67. Esto requiere, que en el código numérico que se implementó las series infinitas sean reemplazadas por sumas finitas extendidas hasta un máximo valor que llamaremos N_{max}. Por lo anterior nuestras sumas de funciones quedan expresadas de la forma:

$$Q_{sca} = \frac{W_s}{W_i} = \frac{2}{(ka)^2} \sum_{n=1}^{N_{max}} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2) \tag{4.1}$$

y

$$Q_{ext} = \frac{W_{ext}}{W_i} = \frac{2}{(ka)^2} \sum_{n=1}^{N_{max}} (2n+1) Re(a_n + b_n). \tag{4.2}$$

4.1.1. Convergencia Numérica

Uno de los controles iniciales a los que se sometió el código numérico fue la convergencia de las sumas (2.66) y (2.67). En las Figs. 4.1-4.3 se muestra la

convergencia numérica respecto del N_{max} tomando esferas de H_2O de distintos tamaños.

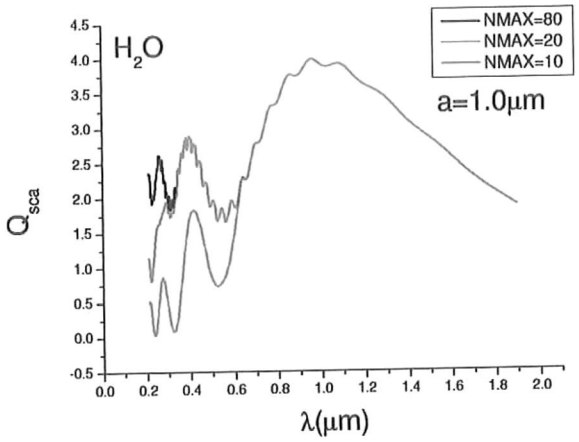

Figura 4.1 Convergencia de la eficiencia esparcida por una partícula de agua y de radio $a = 1{,}0\mu m$ para 3 diferentes N_{max}.

Conforme aumenta el grado de las funciones de Bessel estas van convergiendo (ver figuras 2.1 y 2.2), tal que, se hacen cero cuando n tiende a infinito. De modo que para longitudes de onda muy grandes se observa que la eficiencia esparcida decrece. Esto se debe a que el argumento de las funciones de Bessel ($x = 2\pi a/\lambda_{inc}$) es inversamente proporcional a la longitud de onda, lo cual significa que conforme λ_{inc} se va incrementando nos vamos acercando a cero en x (Fig.2.1). Por lo anterior Q_{sca} causada por partículas de diferentes radios, decrece a medida que λ_{inc} aumenta (Ver figuras 4.1, 4.2 y 4.3). La respuesta de la partícula depende de su tamaño, es decir, conforme el radio de la partícula aumenta, esta puede ser perturbada con más modos denotados por las funciones de Bessel. Puesto que la suma de las funciones de Bessel tiende a infinito, se tuvo que recurrir al truncamiento de estas usando como criterio el hecho de que conforme el radio de la partícula fuera disminuyera, se necesitaría un número menor de términos para las ecuaciones 4.2 y 4.1, y por tanto cortar las sumas en un número finito de N_{max}. En las figuras 4.1 y 4.2 se observa que

la eficiencia esparcida aumenta conforme van aumentando los primeros N_{max}, pero que de un cierto N_{max} en adelante las curvas ya son siempre las mismas. Esto se debe a que cada partícula tiene un límite de perturbación, es decir, dependiendo del tamaño de la partícula, es la respuesta que esta dará al ser incidida por ciertas longitudes de onda.

La partícula de agua con radio $a = 1\mu m$(figura 4.1) es perturbada por la superposición de las funciones de Bessel hasta el grado 30, de acuerdo a nuestros resultados numéricos, los grados más altos ya no los va a *percibe* la partícula. Lo mismo pasa para la partícula de agua con $a = 0{,}2\mu m$ (figura 4.2), pero esta solo es perturbada por funciones de Bessel hasta el grado 10. El aumento de la eficiencia en ambas figuras se observa hasta cierto punto puesto que la suma de las funciones de Bessel solo tienen peso hasta llegar a su límite de perturbación. Radios mucho más pequeños solo pueden ser perturbados por el primer o segundo orden de las funciones de Bessel, como se observa en la figura 4.3.

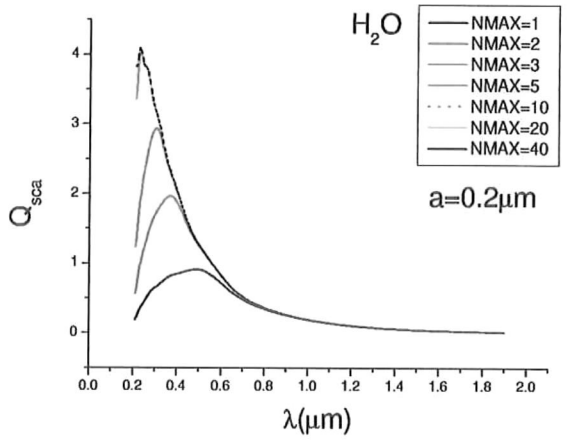

Figura 4.2 Convergencia de la eficiencia esparcida por una partícula de agua y de radio $a = 0{,}2\mu m$ para 7 diferentes N_{max}..

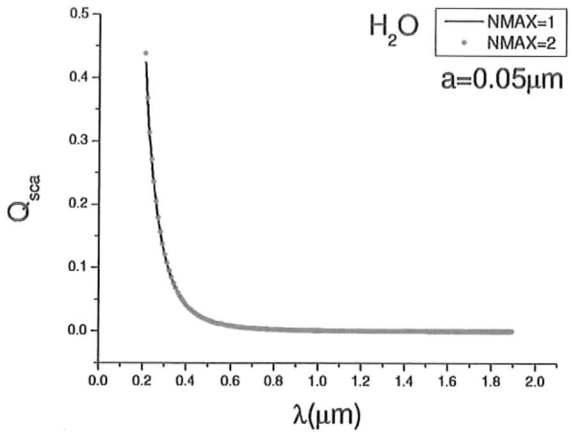

Figura 4.3 Convergencia de la eficiencia esparcida por una partícula de agua y de radio $a = 0{,}05\mu m$ para 2 distintos N_{max}..

4.1.2. Comparación de los resultados con otra implementación numérica

Los autores Bohren and Huffman [7] realizaron un exhaustivo estudio en lo que se refiere al esparcimiento por partículas. En particular implementaron un algoritmo numérico utilizando las funciones de Riccati-Bessel [16]. En la figura 4.4 se muestran las curvas de las eficiencias de esparcimineto(Q_{sca}) de una partícula de agua en función del inverso de la longitud de onda incidente obtenidas con una implementación numérica distinta a la que usan los autores de [7]. En el agua se utilizó el inverso de λ para poder hacer la comparación con la figura 4.5 que se encuentra en el libro anteriormente citado. De la Fig. 4.4 se observa que conforme disminuye el radio de la partícula se presentan menos fluctiaciones en la curva. Estas fluctuaciones son notorias En a=1μm se denominan *estructuras de riple.*

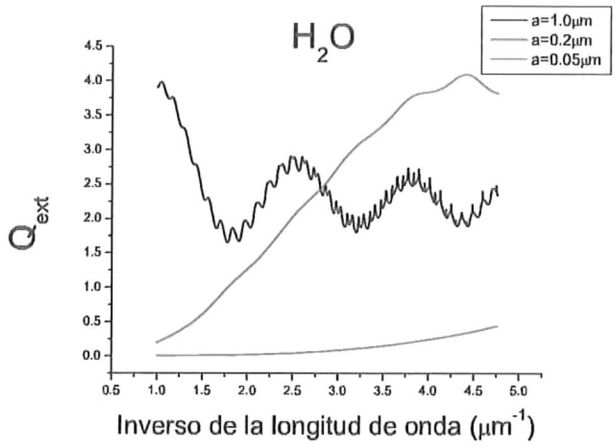

Figura 4.4 Gráfica de la eficiencia de extinsión para una partícula de agua con tres radios distintos.

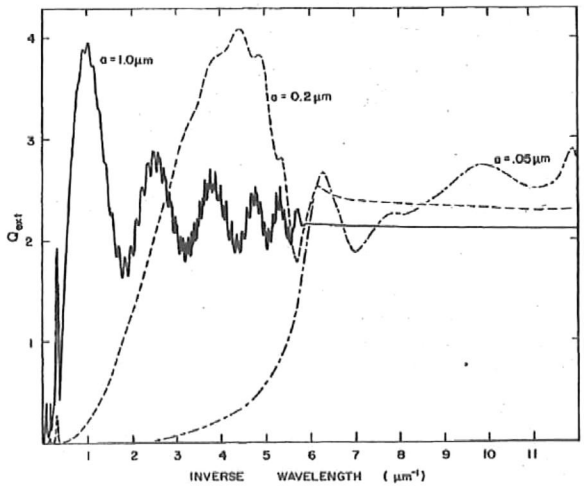

Figura 4.5 Gráfica de la eficiencia de extinsión que se encuentra en la página 105 de la referencia [7] para una partícula de agua con 3 radios distintos.

4.2. Resultados para metales

Para el caso de la plata, en la figura 4.6 se observan picos en las curvas de las eficiencias en $\lambda \approx 0{,}39\mu m$ que se van atenuando conforme aumenta el radio de la partícula.

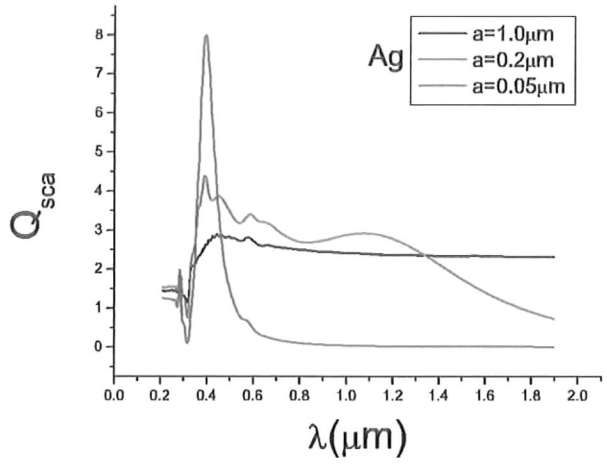

Figura 4.6 Gráfica eficiencia esparcida para una partícula de plata con diferentes radios.

En la figura 4.7 se presentan las curvas de esparcimiento para el oro donde se observa un pico de resonancia en aproximadamente $\lambda = 0{,}53\mu m$

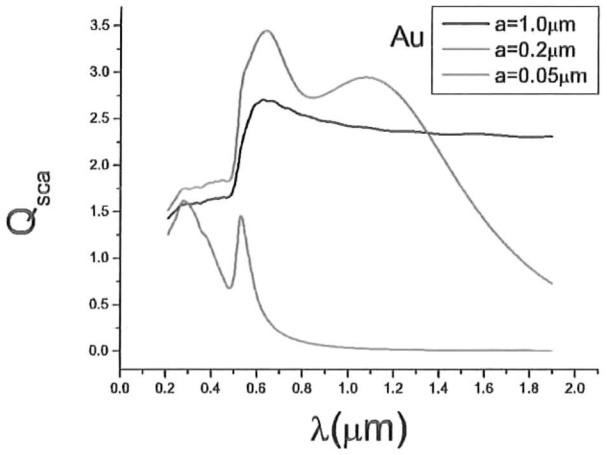

Figura 4.7 Gráfica eficiencia esparcida para una partícula de oro con diferentes radios.

4.3. Comparación con la aproximación dipolar

En las curvas de la figura 4.8 se compara la eficiencia esparcida obtenidas mediante el método de aproximación dipolar y la Teoría de Mie. Se observa que las dos curvas coinciden. En λ=0.35μm, donde se encuentra el pico, corresponde a una resonancia que se presenta cuando $\varepsilon = -2$, haciéndose cero el denominador de la Ec. 3.18. Esto se debe a que para materiales conductores se pueden tener permitividades negativas asociadas a la capacidad de absorción del material. Se verifica entonces que los dos métodos coinciden para radios muy pequeños, en comparación de la longitud de onda incidente.

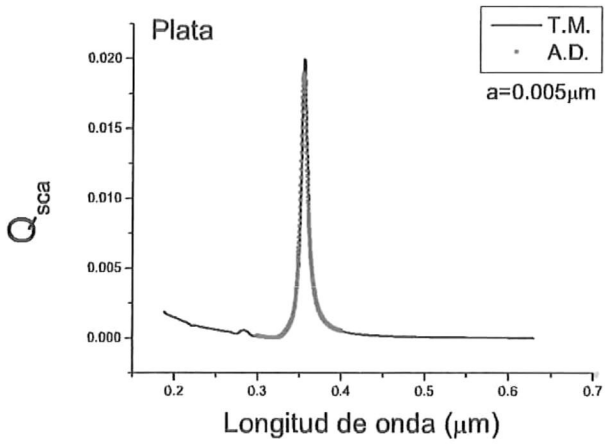

Figura 4.8 Curvas de la eficiencia esparcida para una partícula de plata obtenidas con el método de aproximación dipolar y con la Teória de Mie.

Capítulo 5

Conclusiones

Se desarrolló el formalismo matemático de la Teoría de Mie para calcular los coeficientes de extinción y esparcimiento en función de la longitud de onda provocados por una esfera de radio arbitrario. Se realizaron varias pruebas de convergencia que permitieron establecer un criterio de truncamiento para las expresiones 2.66,2.67, las que finalmente quedan representadas por las expresiones 4.1,4.2. Se reprodujeron las curvas que se encuentran en el Bohren an Huffman [7] pero con una implementación numérica distina. Las curvas de la aproximación dipolar se obtuvieron bajo la condición de que el radio dc la esfera tiene que ser mucho más pequeño que la longiud dc onda quc lc incidc, cs dccir, $a << \lambda$. Sc compararon, en radios pequeños, los métodos dc la teorìa de Mie y el dc aproximación dipolar observando la coincidencia de ambos. Los códigos de los programas para obtener los coeficientes de extinción y esparcimiento se escribieron en FORTRAN 90.

En el método para los radios arbitrarios se verificó que el truncamuento da resultados confiables debido a la convergencia numérica de las funciones de Bessel. En las curvas obtenidas por el método de la teoría de Mie para radios arbitrarios se observa que conforme aumenta el radio de la partícula se presentan más esctucturas de ripple (Figuras 3.1, 3.2 y 3.3).

En el método de aproximación dipolar (Figura 3.4) hay una resonancia en λ=0.035μm, valor que corresponde a la frecuencia de plasma, que ocurre cuando el material presenta una permitividad negativa, lo cual es una característica dc los metales.

Apéndice A

Ecuación de Helmholtz

A.1. Ecuación de Helmholtz vectorial

Relaciones constitutivas

$$\mathbf{d} = \epsilon \mathbf{e} \tag{A.1}$$

$$\mathbf{b} = \mu \mathbf{h} \tag{A.2}$$

Utilizando las relaciones constitutivas en (1.1) y aplicando de ambos lados el rotacional

$$\nabla \times \Big[\nabla \times \mathbf{e}(\mathbf{r}, t)\Big] = \frac{-\mu}{c} \nabla \times \Big[\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{h}(\mathbf{r}, t)\Big] = 0, \tag{A.3}$$

llegamos a la ecuación de onda

$$\nabla^2\Big[\mathbf{e}(\mathbf{r}, t)\Big] - \frac{\mu\epsilon}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Big[\mathbf{e}(\mathbf{r}, t)\Big] = 0. \tag{A.4}$$

Una función con dependencia armónica en el tiempo es de la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \tag{A.5}$$

Si sustituímos (3.5) en (3.4) llegamos a la ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) + k^2\mathbf{E}\mathbf{r} = 0 \tag{A.6}$$

donde $k^2 = (\mu\epsilon\omega^2)/c^2$

A.2. Ecuación de Helmholtz escalar

$$\nabla^2\mathbf{M} + k^2\mathbf{M} = \nabla \times [\nabla^2(\mathbf{c}\Psi)] + \nabla \times [k^2(\mathbf{c}\Psi)] \tag{A.7}$$

$$\Rightarrow \nabla \times [\mathbf{c}(\nabla^2\Psi)] + \nabla \times [\mathbf{c}(k^2\Psi)] = \nabla \times [\mathbf{c}(\nabla^2\Psi + k^2\Psi)] \tag{A.8}$$

Apéndice B

B.1. Simulación numérica

La implementación del programa se realizó de la siguiente manera:

1. Se calcularon las Funciones esferícas de Bessel, las Funciones esferícas de Hankel y sus respectivas derivadas para una longitud de onda.
2. Se calcularon los coeficientes de las Ecs. 2.52-2.55 para N_{max} funciones de Bessel con cada longitud de onda.
3. Se truncaron las expresiones (2.66)-(2.67) en N_{max}.
4. Se repitió el ciclo para varias longitudes de onda.

DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROGRAMA

Los coeficientes de extinción y esparcimiento se obtuvieron de un código de programa escritos en FORTRAN 90. Para calcular las funciones de Bessel y Hankel que usa el programa se utilizó un paquete de subrutinas llamadas ZAMOS(Autor Donald E. Amos del Sandia National Laboratories). Estas subrutinas evalúan las funciones de Bessel incluso con materiales absorbentes los cuales tienes argumentos complejos. Para obtener las curvas del agua se utilizaron los datos de [6] y para los metales se usaron los datos que están en [7]. Para el agua y los metales se implementaron las subrutinas denominadas spline las cuales hacen la interpolación de las longitudes de onda.

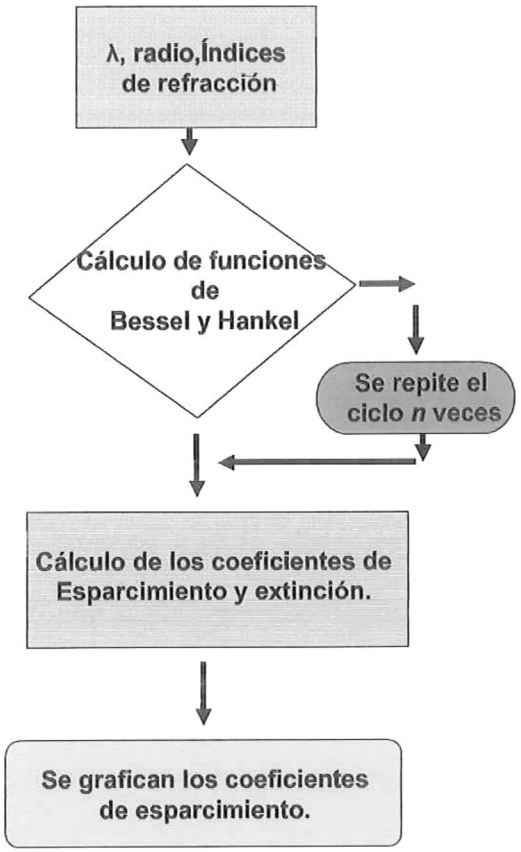

Figura B.1 Diagrama de flujo de la simulación numérica.

Bibliografía

[1] J. Van Bladel. *Electromagnetic Fields*, hpc, 1985

[2] J. D. Jackson *Classical Electrodynamics*, 3rd Ed. John Willey and Sons, 1998.

[3] J. A. Straton, *Electromagnetic Theory*, McGraw-Hill, 1941.

[4] M. I. Mishchenko, L. D. Travis and A. A. Lacis, *Multiple scattering of light by particles*, Cambridge University Press, 2006.

[5] L. Tsang, J. A. Kong, K-H Ding and C. O. Ao, *Scattering of electromagnetic wave*, John Willey and Sons, 2001.

[6] A. Ishimaru, *Wave propagation and scattering in random media* ,Vol. 1, Academic Press, 1978.

[7] C. Bhoren and D.Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles.*, Wiley-VCH, 1983.

[8] G. Mie. *Beiträge zur optic trüber Medien Kolloidaler Metalösugen*, Ann Phys. 25, 377-475 (1908).

[9] P. Debye. *Der Lichtdruk auf Kuglen von beliebigem Material*, Ann Phys. 30, 57-136 (1909).

[10] X. M. Hua and J.I. Gresten, "*Therory of second-harmonic generation by small metal spheres*," Phys. Rev. B 33, 3756-3774 (1986).

[11] George M. Hale and Marvin R. *Querry Optical Constants of Water inthe 200-nm to 200-μm Wavelength Region.* Applied Optics, 12-3, 555-563 (1973).

[12] P.B. Johonson and R.W. Christy. Optical constants of the noble metals. Phys. Rev. B **6** 4370-4379 (1972).

[13] George B. Arfken and Hans J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Ccademic Press, 2005.

[14] Philippe Dennery and André Krzywicki. *Mathematics for Physicists* , Dover, 1996.

[15] Philip M. Morse and Herman Feshbach. *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill,1953.

[16] G. N. Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1958.