



**INSTITUTO POTOSINO DE INVESTIGACIÓN
CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C.**

POSGRADO EN CIENCIAS APLICADAS

**Implementación De Un Algoritmo Con El Método De
Diferencias Finitas En El Dominio Del Tiempo
Para Estudiar Propiedades Ópticas En Metales**

Tesis que presenta

José Antonio Robledo Torres

Para obtener el grado de

Maestro en Ciencias Aplicadas

En la opción de

Ciencia de Materiales

Director de la Tesis

Dr. José Luis Rodríguez López

San Luis Potosí, S.L.P., 7 de Marzo del 2013



Constancia de Aprobación de la Tesis

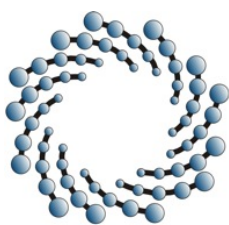
La tesis **Implementación De Un Algoritmo Con El Método De Diferencias Finitas En El Dominio Del Tiempo Para Estudiar Propiedades Ópticas En Metales** presentada para obtener el Grado de de Maestro en Ciencias Aplicadas en la opción de Ciencia de Materiales, fue elaborada por **José Antonio Robledo Torres** y aprobada el **26 de Febrero del 2013** por los suscritos, designados por el Colegio de Profesores de la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

Dr. José Luis Rodríguez López
División de Materiales Avanzados, IPICYT
Director de la Tesis

Dr. José Manuel Nápoles Duarte
Facultad de Ciencias Químicas,
Universidad Autónoma de Chihuahua
Asesor de la Tesis

Dr. Ricardo Alberto Guirado López
Instituto de Física, UASLP
Sinodal, Examinador externo

Dr. José Luis Ricardo Chávez
División de Materiales Avanzados, IPICYT
Sinodal, Examinador Interno



IPICYT

Créditos Institucionales

Esta tesis fue elaborada en la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., bajo la dirección del Dr. José Luis Rodríguez López.

Durante la realización del trabajo el autor recibió una beca académica del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (No. de registro 250283) y soporte económico otorgado por el comité de becas de la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A. C.



Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

Acta de Examen de Grado

El Secretario Académico del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., certifica que en el Acta 008 del Libro Primero de Actas de Exámenes de Grado del Programa de Maestría en Ciencias Aplicadas en la opción de Ciencia de Materiales está asentado lo siguiente:

En la ciudad de San Luis Potosí a los 7 días del mes de marzo del año 2013, se reunió a las 17:00 horas en las instalaciones del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., el Jurado integrado por:

| | | |
|--|-------------------|---------------|
| Dr. Ricardo Alberto Guirado López | Presidente | UASLP |
| Dr. José Luis Rodríguez López | Secretario | IPICYT |
| Dr. José Luis Ricardo Chávez | Sinodal | IPICYT |

a fin de efectuar el examen, que para obtener el Grado de:

**MAESTRO EN CIENCIAS APLICADAS
EN LA OPCION DE CIENCIA DE MATERIALES**

sustentó el C.

José Antonio Robledo Torres

sobre la Tesis intitulada:

Implementación de un algoritmo con el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo para estudiar propiedades ópticas en metales

que se desarrolló bajo la dirección de

Dr. José Luis Rodríguez López

El Jurado, después de deliberar, determinó

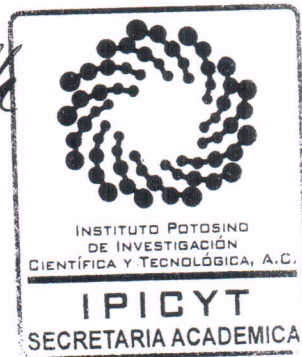
APROBARLO

Dándose por terminado el acto a las 18:10 horas, procediendo a la firma del Acta los integrantes del Jurado. Dando fe el Secretario Académico del Instituto.

A petición del interesado y para los fines que al mismo convengan, se extiende el presente documento en la ciudad de San Luis Potosí, S.L.P., México, a los 7 días del mes de marzo de 2013.


Mtra. Ivonne Lizette Cuevas Vélez
Jefa del Departamento del Posgrado


Dr. Marcial Bonilla Marín
Secretario Académico



A mi familia.

Mi novia beibipau.

Y mis amigos.

Agradecimientos

A los Drs. José Luis Rodríguez López y José Manuel Nápoles Duarte por su significativa contribución para este trabajo.

ÍNDICE GENERAL

| | |
|---|----|
| <i>Resumen</i> | 1 |
| <i>Abstract</i> | 3 |
| 1. <i>Motivación y Estado del Arte</i> | 5 |
| 1.1. <i>Introducción</i> | 5 |
| 2. <i>Hipótesis de Trabajo y Objetivo General</i> | 13 |
| 2.1. <i>Hipótesis de Trabajo</i> | 13 |
| 2.2. <i>Objetivo General</i> | 13 |
| 3. <i>Marco Teórico</i> | 15 |
| 3.1. <i>Modelo de Drude</i> | 15 |
| 3.2. <i>Diferencias Finitas</i> | 17 |
| 3.3. <i>FDTD 1D</i> | 18 |
| 3.4. <i>FDTD 2D</i> | 25 |
| 4. <i>Resultados</i> | 35 |
| 4.1. <i>FDTD 1D</i> | 35 |
| 4.2. <i>FDTD 2D</i> | 41 |
| 5. <i>Conclusiones y Perspectivas</i> | 51 |
| 5.1. <i>Conclusiones</i> | 51 |
| 5.2. <i>Perspectivas</i> | 51 |
| <i>Bibliografía</i> | 53 |

Resumen

Todos los fenómenos relacionados con los campos electromagnéticos son correctamente descritos por la teoría electromagnética desarrollada por James Clerk Maxwell en 1873, donde se conecta y se formula matemáticamente las leyes conocidas de Gauss, Faraday y Ampere, confirmando con esta teoría, la naturaleza ondulatoria de la luz, propagandose tanto en el vacío como en los materiales.

La teoría de Drude es un modelo para estudiar las propiedades físicas de los metales, y principalmente proporciona una función dieléctrica que nos ayuda a estudiar la interacción entre los metales y la luz.

Una herramienta que nos permite resolver las ecuaciones de Maxwell dependientes del tiempo de forma numérica, describiendo correctamente el fenómeno de la interacción luz-materia, es el metodo de Diferencias Finitas en el dominio del tiempo (FDTD, por sus siglas en Ingles). Este método ha sido ampliamente utilizado en el campos de investigación en ingeniería, tales como el eléctrico, el militar, en sistemas de telecomunicaciones, etc.; y mas recientemente en el estudio de nanoestructuras metálicas. Se complementará el método FDTD con la implementación de condiciones de frontera absorbentes, como son las capas perfectamente adaptadas (PML, por sus siglas en Ingles).

Se presentan los resultados del algoritmo desarrollado para partículas individuales de metal en una (1D) y dos (2D) dimensiones.

Abstract

All phenomena related to electromagnetic fields are correctly described by the electromagnetic theory developed by James Clerk Maxwell in 1873, where he connected and mathematically formulated the laws known from Gauss, Faraday and Ampere, confirming with this theory the wave nature of light, which propagates in vacuum as well as in materials.

The Drude theory is a model to study physical properties in metals, which mainly provides a dielectric function which helps us to study the interaction between metals and light.

A tool that allows us to solve the time dependent Maxwell equations in a numeric way, describing correctly the phenomenon of light-matter interaction, is the Finite Differences Time Domain method (FDTD). This method has been widely used in field of engineering research, such as electric, military, telecommunications systems and recently in the study of metal nanostructures. You will complement the FDTD method with the implementation of absorbing boundary conditions, such as are the layers perfectly matched (PML).

We present results of the developed algorithm for individual metal particles in one and two dimensions.

Capítulo 1

Motivación y Estado del Arte

1.1. INTRODUCCIÓN

La luz es un fenómeno que ha estado presente desde la formación del universo y hasta nuestros días. La manera como interpretamos muchos eventos que ocurren en la naturaleza está íntimamente ligada al comportamiento de la luz, más propiamente a su interacción con la materia.

Para estudiar esta interacción, podemos comenzar por mencionar las propiedades de la luz, las cuales se han ido determinando a través de los años; sabemos que su naturaleza es ondulatoria, hemos medido su velocidad (3×10^8 m/s en el vacío) y sabemos que su energía es proporcional a su longitud de onda.

A principios del siglo XX se descubrió que la luz, además, manifiesta un comportamiento semejante al de una partícula. Cuando la luz presenta éste comportamiento se le llama fotón. Para entender de manera general los fenómenos presentes en la interacción de luz y materia, analizaremos lo que ocurre cuando un fotón entra en contacto con un átomo de nuestro material, dicho fotón interactúa con los electrones de dicho átomo.

La respuesta de un electrón al "*sentir*" la presencia de un fotón puede ser de dos formas, lo absorbe o lo transmite. La absorción de un fotón se puede observar esquemáticamente en la Fig. 1, a partir de la cual podemos decir que cuando la energía de un fotón es igual a la energía necesaria para llevar un electrón del nivel E_2 al nivel E_4 entonces dicho fotón será absorbido. Si la energía del fotón no es suficiente para llevar un electrón a otro nivel de energía, el fotón será transmitido al través de los electrones de los átomos que forman nuestro material, como se puede observar en la Fig. 2, donde un fotón, al incidir en el material es parcialmente absorbido por un electrón (b), posteriormente se transmite a un electrón vecino (c) y así sucesivamente, hasta que finalmente es emitido por el último electrón del

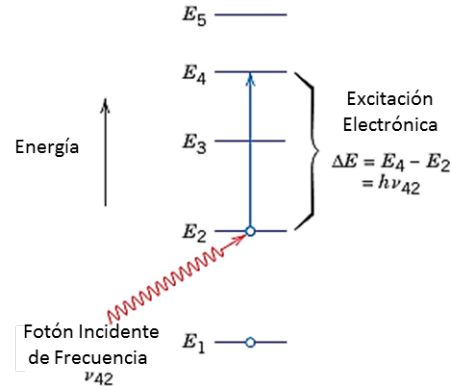


Figura 1: Absorción de un fotón.

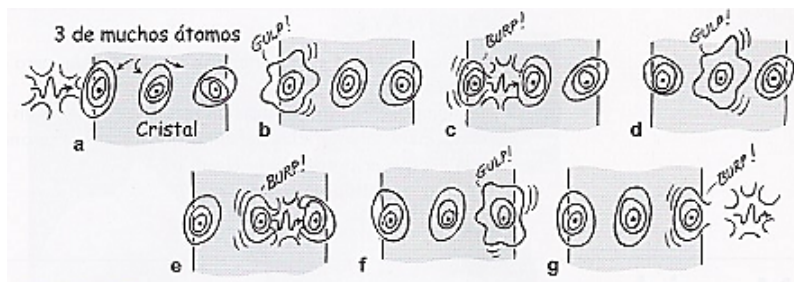


Figura 2: Transmisión de un fotón por medio de su interacción con los electrones del material.

material (g), completándose el proceso de transmisión del fotón.

A partir de la cantidad de fotones que son absorbidos, o transmitidos en un material, podemos hacer la siguiente clasificación de materiales:

- **Materiales Transparentes:** son aquellos que presentan poca absorción y reflexión. La mayor parte de la luz que incide en ellos es transmitida.
- **Materiales Translúcidos:** en estos la luz se transmite de forma difusa. Cuando vemos un objeto detrás de estos materiales lo observamos de manera borrosa.
- **Materiales Opacos:** son los que no permiten el paso de la luz en una cantidad considerable. La mayor parte de la luz que incide sobre es reflejada o bien absorbida. La transmisión en estos materiales es prácticamente nula.

Dentro de los Materiales Opacos se encuentran los metales, estos han sido usados desde las primeras civilizaciones ya fuera para cacería, uso doméstico, etc., y hasta nuestros días, por ejemplo, en la fabricación de aleaciones para uso aeroespacial. Entre las principales propiedades de los metales podemos mencionar su

eficiente conducción de calor y electricidad, su alta densidad, etc. En cuanto a su respuesta a la radiación incidente podemos decir que la absorción de la luz se lleva a cabo en una capa de menos de $1 \mu\text{m}$ de espesor, esto es, en la superficie del metal, y la re-emisión de dicha luz es instantánea en forma de luz reflejada (luz que no es absorbida al incidir en un material). El porcentaje de la radiación reflejada en metales es de entre 90 y 95 % de la luz incidente.

Por otro lado es importante señalar que la luz al viajar a través de un medio, ya sea transparente o translúcido, lo hace con mayor lentitud respecto a su velocidad en el vacío, a partir de este hecho podemos encontrar una relación entre la velocidad de la luz en el vacío c y la velocidad de la luz en el medio v . Dicha relación se conoce como índice de refracción del medio y se denota con el símbolo n . La velocidad de la luz en el medio v es función de dos constantes intrínsecas del material: la permitividad eléctrica ó constante dieléctrica ϵ y la permeabilidad magnética μ .

La interacción de la luz y la materia se ha estudiado teórica y experimentalmente desde hace muchos años. Cuando nuestro medio es un material opaco, más específicamente, un metal, podemos utilizar un modelo teórico para estudiar la interacción de éste con la luz, típicamente se aplica el modelo del Gas de Electrones Libres (o Densidad de Gas de Fermi), el cual fué desarrollado en el año 1900 * por Paul Drude, de donde toma el nombre de Modelo de Drude. Este será revisado en el siguiente capítulo, y en base a esto se estudiará la respuesta de un material metálico a la radiación que incida en él.

La luz además de reflejarse en una superficie metálica puede quedar atrapada momentáneamente en ella bajo ciertas condiciones, esto debido al acoplamiento u oscilación coherente de todos los electrones libres en la banda de conducción que los lleva a una oscilación en fase con la oscilación del Campo Eléctrico de la Luz [1–5]. Este fenómeno fue predicho por Rufus Ritchie en 1959 y se conoce como **Plasmón Superficial** (PS), el cual se manifiesta principalmente en superficies de metales con poca resistencia eléctrica, como oro o plata, y ha sido usado de manera indirecta desde hace siglos en la fabricación de Vitrales donde algunos colores vienen determinados por la presencia de pequeñas partículas de oro o plata en el interior del vidrio [6]. Un ejemplo específico es la Copa de Lycurgus (Fig. 3) la cual tiene una respuesta óptica que se manifiesta por medio del color, dependiendo de la zona donde sea iluminada.

En la actualidad la síntesis de partículas metálicas a escala nanométrica conocidas como nanopartículas (NPs), ha impulsado el estudio de la respuesta de estas a la radiación electromagnética. En términos generales, cuando hablamos de NPs nos referimos a pequeños clusters ó moléculas gigantes (menos de 100 átomos y dimensiones de alrededor de 1 nm) y hasta partículas grandes compuestas por de-



Figura 3: *Copa de Lycurgus iluminada externa e internamente.*

cenas o cientos de miles de átomos con dimensiones del orden de decenas o cientos de nanómetros.

Una de las razones del estudio de materiales nanoestructurados desde un punto de vista tecnológico es principalmente por sus aplicaciones en sistemas ópticos y en catálisis [7–10]. Por ejemplo, el estudio de NPs en el área de catálisis ha sido muy exitoso debido a la alta relación superficie-volumen que presentan las NPs y los arreglos de sistemas nanoestructurados [7], ya que mientras se reducen las dimensiones de una partícula, se incrementa el número de átomos en la superficie de ésta. La Fig. 4 nos muestra (a la izq.) el cociente entre el número de átomos de superficie contra los de volumen, lo que conocemos como relación de dispersión, a la derecha, en porcentaje observamos que una partícula de 2.5 nm presenta la mitad de sus átomos en la superficie, comparada contra una de 1 nm, en la cual prácticamente todos los átomos están en la superficie. Esta relación es dependiente de la forma de las NPs, pero se cumple en general.

En general las NPs están compuestas de metales en su estado de valencia neutro o como sus óxidos, sulfuros, selenuros, etc. Los diferentes tamaños y formas de las NPs determinan las frecuencias de resonancia del PS, obteniéndose un amplio rango de colores. Sabemos que en las NPs esta resonancia no da lugar a una absorción más intensa en clusters pequeños sino más bien a un fuerte amortiguamiento [12–15]. Para partículas de algunas decenas de nanómetros, en las que su tamaño es pequeño comparado con la longitud de onda de la luz, la excitación puede tener lugar con luz visible, por lo que remarcamos que el espectro de absorción óptica depende directamente del tamaño de las NPs (Fig. 5), considerado este hecho dentro de los así llamados efectos extrínsecos de tamaño [12]. El ancho de banda del plasmón se puede asociar con el desfase de la oscilación coherente de

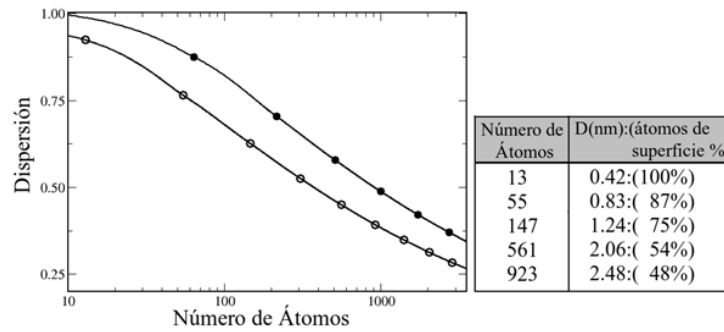


Figura 4: La dispersión como función del tamaño en agregados atómicos con estructuras cúbica simple (curva con círculos cerrados) y cubo-octaedrales e icosaedrales (curva con círculos abiertos). En el recuadro se muestra la misma información expresada en números. Fig. adaptada de la Ref. [11]

los electrones [17–25].

Experimentalmente, se observa una dependencia del espectro de absorción óptica con el tamaño de la nanopartícula [2, 12, 13, 26]. Para partículas de 5 nm la oscilación del Plasmón es fuertemente amortiguada por lo que se tiene una absorción débil y desaparece completamente para partículas menores a 2 nm de diámetro [14, 15, 27]. Esto es porque la densidad electrónica en la banda de conducción se vuelve muy pequeña. Está demostrado de manera teórica [13, 28, 29] y experimental [28–32] que el ancho de banda del plasmón es inversamente proporcional al radio de la partícula.

Otro de los efectos que parece ser incluso más marcado en el espectro de absorción óptica, es la forma de las NPs [33–35] (Fig. 6). Por ejemplo en NPs con forma de barra o forma elipsoidal se tiene una banda de absorción de mayor energía que corresponde a la oscilación de los electrones perpendicular al eje mayor y es referida como absorción transversal del plasmón. La otra banda de absorción (de menor energía) es causada por la oscilación de los electrones libres a lo largo del eje mayor y se conoce como absorción longitudinal del plasmón superficial.

Para conocer los espectros de absorción en NPs se emplea la teoría desarrollada en 1908 por Gustav Mie; la cual es una teoría semianalítica para la dispersión de una onda plana de partículas esféricas o elipsoidales con índice de refracción arbitrario [6]. Esta teoría ha sido hasta la fecha muy exitosa [2–5, 12]; sin embargo nos conduce a modelos sin solución analítica para partículas con forma arbitraria y diferente de la esférica.

Las propiedades ópticas de NPs metálicas, así como su interacción con substratos metálicos y dieléctricos son de considerable interés teórico y experimental, con

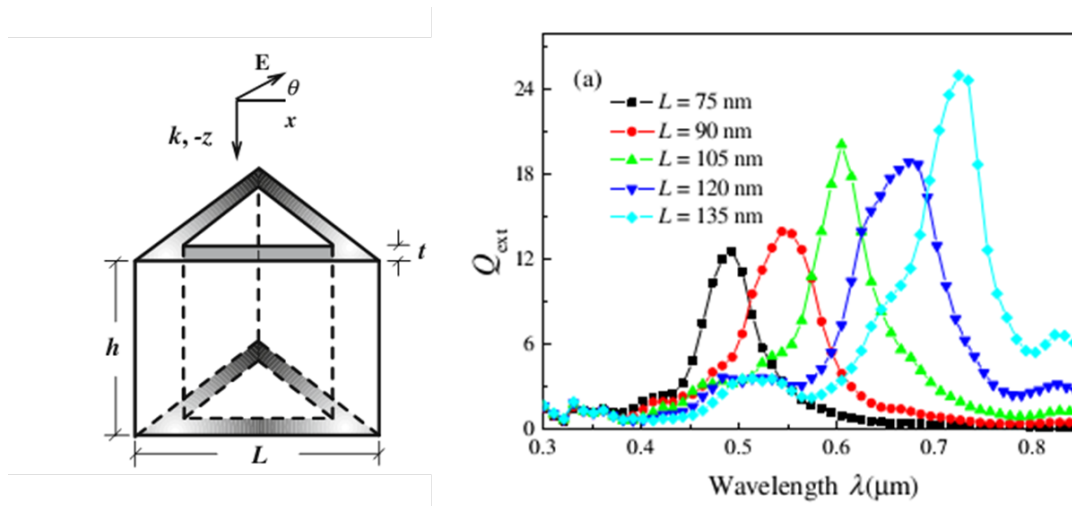


Figura 5: A la izquierda un esquema del tipo de polarización, así como de los parámetros espaciales de la Nanopartícula. A la derecha: Espectro de extinción para diferentes valores de L , con $h = 45$ nm y $t = 15$ nm. Ref. [16].

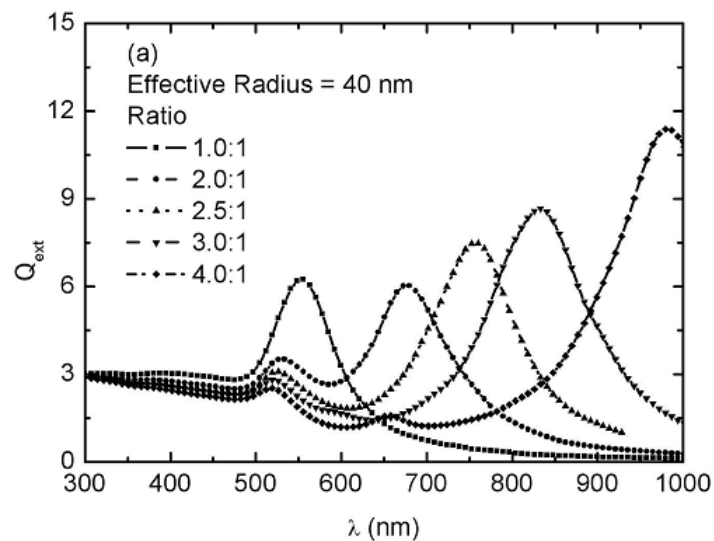


Figura 6: Coeficiente de extinción en NPs esféricas con radio del eje menor de 40 nm. Ref. [36]

fuertes aplicaciones en fotónica y recientemente en medicina y biología entre otras, como puede ser en diagnósticos médicos y aplicaciones terapéuticas [37–39].

Todos los fenómenos relacionados con campos electromagnéticos son correctamente descritos por medio de la teoría desarrollada por James Maxwell en 1873, donde formula y relaciona matemáticamente las Leyes de Gauss, Faraday y Ampepe, logrando confirmar la naturaleza de la luz en forma de ondas electromagnéticas que se propagan tanto en el vacío como en medios materiales. La teoría de Maxwell será el punto de partida para el desarrollo de este trabajo de tesis. Una herramienta para resolver numéricamente las ecuaciones que nos describen el fenómeno de la interacción luz-materia es el método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD por sus siglas en inglés). Este método ha sido usado ampliamente en investigación de ingeniería eléctrica, militar, en sistemas de telecomunicaciones y recientemente en el estudio de nanoestructuras metálicas (Fig. 7). Dicha técnica fue introducida por Yee [41] en el año 1966. Además complementaremos el método FDTD con la implementación de las condiciones de frontera adecuadas. Éstas son de la familia de condiciones de fronteras absorbentes (ABCs por sus siglas en inglés). De manera específica, las capas perfectamente adaptadas o PMLs (Perfectly Matched Layer), se definen como capas especialmente diseñadas para absorber completamente las ondas electromagnéticas que en ellas inciden. La eficiencia de ésta técnica ha sido verificada por varios grupos previamente [42,43].

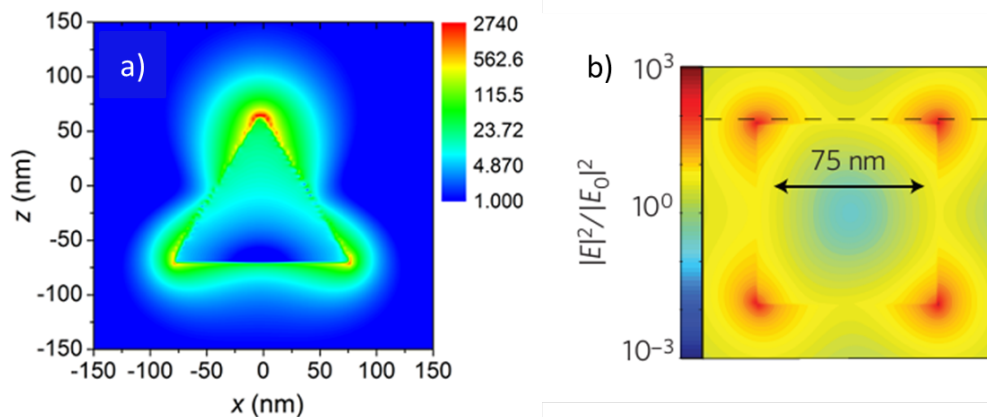


Figura 7: Simulaciones de la respuesta óptica de NPs con diferente forma y tamaño realizadas con el método FDTD. a) Ref. [6]. b) Ref. [40]

En el siguiente capítulo presentamos nuestra hipótesis de trabajo así como el objetivo general que perseguimos. En el capítulo 3 revisaremos el modelo de drude de manera detallada lo que nos permitirá asignarle propiedades metálicas a regiones de nuestro espacio de simulación, discretizaremos las ecuaciones de

Maxwell en una y dos dimensiones para generar una onda electromagnética que se propaga, e implementaremos las condiciones de frontera adecuadas, además de generar algoritmos que nos permitan disponer de arreglos de NPs metálicas. Finalmente en el Capítulo 4 se mostrarán y discutirán los resultados obtenidos en las simulaciones, además de dar las conclusiones y perspectivas de este trabajo.

Capítulo 2

Hipótesis de Trabajo y Objetivo General

2.1. HIPÓTESIS DE TRABAJO

Una de las teorías para el estudio de propiedades físicas de metales es la desarrollada en 1905 por Paul Drude, en la cual se proporciona una función dieléctrica para metales. Haciendo uso de ésta función y de las ecuaciones de Maxwell con dependencia temporal (las cuales nos describen el movimiento de una onda electromagnética), formulamos nuestra hipótesis de trabajo que consiste en determinar si es posible elaborar un conjunto de ecuaciones que se discreticen con el método FDTD para estudiar la interacción entre una onda electromagnética en un determinado rango de energías con pequeñas partículas metálicas.

2.2. OBJETIVO GENERAL

Nuestro objetivo principal es implementar de manera confiable las ecuaciones de Maxwell de manera discreta, que nos generen un espacio de simulación donde se pueda estudiar la interacción de la luz y partículas metálicas. Más específicamente, se pretende desarrollar un programa que nos permita visualizar el fenómeno del Plasón Superficial (por medio de sus diferentes modos de acoplamiento) presente en materiales metálicos de 1D y 2D.

Capítulo 3

Marco Teórico

La teoría empleada en el desarrollo de este trabajo comprende el modelo de Drude para metales, en el cual se consideran a los electrones de conducción como un gas de electrones libres y proporciona una función dieléctrica para describirlos en un medio o materia; de este modo podremos generar formas geométricas con características y propiedades metálicas. Presentaremos las ecuaciones de Maxwell con dependencia temporal, las que van a describir la evolución de las componentes campo eléctrico E y campo magnético H de una onda electromagnética, también revisaremos la teoría que está detrás de las condiciones de frontera implementadas en esta tesis.

3.1. MODELO DE DRUDE

Este modelo es usado como una forma rápida y práctica para representar de manera simple las propiedades de los metales. Está basada en cuatro hipótesis básicas:

1. Las interacciones de la colisión entre un electrón dado con otros electrones y con los iones son despreciadas. Así, en la ausencia de un campo electromagnético externo aplicado, cada electrón se mueve uniformemente en línea recta. En la presencia de un campo externo aplicado, cada electrón se mueve bajo las leyes de movimiento de Newton pero despreciando los campos producidos por las demás partículas. Las interacciones despreciadas electrón-electrón entre colisiones es conocida como la aproximación de electrón libre.

2. Las colisiones son eventos instantáneos que alteran la velocidad de un electrón debido al rebote con los núcleos iónicos.

3. Se asume que un electrón que experimenta una colisión, sufre un cambio abrupto en su velocidad, con una probabilidad por unidad de tiempo $1/\tau$. Esto dice que la probabilidad que un electrón experimente una colisión en cualquier in-

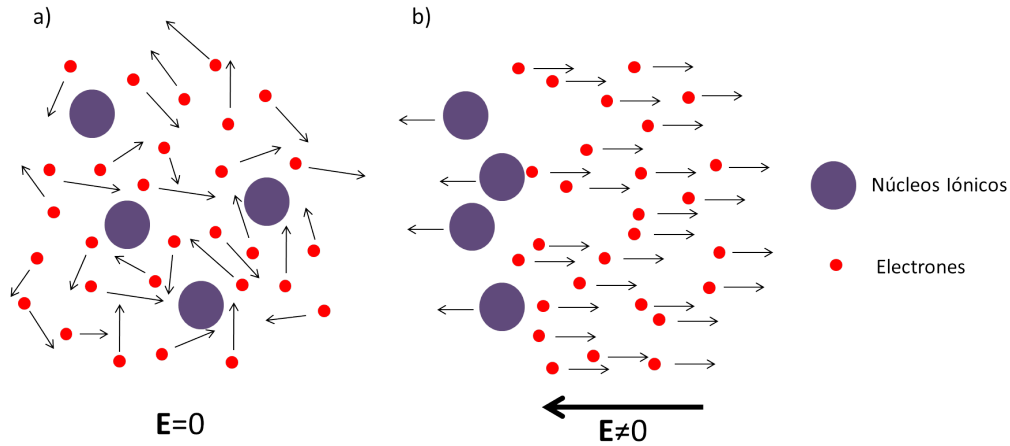


Figura 8: Imágen representativa de las hipótesis de Drude.

tervalo de tiempo infinitesimal dt es dt/τ , τ es conocido como tiempo libre medio. En el modelo de Drude el tiempo de colisión τ es independiente de la posición del electrón y su velocidad.

4. Los electrones alcanzan el equilibrio térmico con sus alrededores sólo a través de las colisiones. Se asume que estas colisiones mantienen el equilibrio termodinámico local en una forma particular; inmediatamente después de una colisión un electrón sale con una velocidad que no está relacionada con su velocidad antes de la colisión, pero su rapidez es apropiada a la temperatura que predomina en el lugar donde la colisión ocurre. Luego, en la región más caliente donde la colisión ocurre, es que saldrá el electrón más rápido de la colisión. Un esquema de las hipótesis de Drude se muestra en la Fig. 8.

A partir de estas hipótesis se genera una ecuación de movimiento, considerando las variaciones temporales en la cantidad de movimiento en función de, la relación entre la cantidad de movimiento y el tiempo libre medio, así como el campo eléctrico aplicado E . Así pues, la ecuación de movimiento de un electrón libre en presencia de un campo eléctrico y considerando únicamente las colisiones con impurezas, imperfecciones de la red ó fonones (vibraciones de la red) es:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{p}{\tau} - eE. \quad (3.1)$$

Asumiendo una dependencia temporal del campo eléctrico E obtenemos una solución a la ecuación diferencial (3.1),

$$-m\omega^2 x = \frac{m}{\tau} i\omega x - eE, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{x} = \frac{e\mathbf{E}}{m\omega \left(\omega + \frac{i}{\tau} \right)}. \quad (3.3)$$

El momento dipolar o polarización del gas de electrones es:

$$\mathbf{P} = -n e \mathbf{x} = \frac{n e^2 \mathbf{E}}{m\omega \left(\omega + \frac{i}{\tau} \right)}. \quad (3.4)$$

La función dieléctrica será entonces:

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega) &= 1 + \frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0 \mathbf{E}}, \\ &= 1 - \frac{n e^2}{\epsilon_0 m \omega \left(\omega + \frac{i}{\tau} \right)}, \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega (\omega + i\gamma)}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde ω_p^2 y γ son respectivamente:

$$\omega_p^2 = \frac{n e^2}{\epsilon_0 m}, \quad (3.6)$$

$$\gamma = \frac{1}{\tau}. \quad (3.7)$$

Las Ecs. (3.6) y (3.7) nos arrojan los parámetros necesarios para poder generar partículas con propiedades semejantes a las de un metal y dichos parámetros son diferentes para cada metal.

3.2. DIFERENCIAS FINITAS

Las diferencias finitas juegan un papel importante dentro de los métodos numéricos, es una forma útil de aproximar la derivada de una función. En la Fig. 9 tenemos una función evaluada en 3 puntos. Podemos aproximar la derivada de la función por tres caminos. La diferencia finita por la izquierda:

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{x - (x-h)} = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}, \quad (3.8)$$

la diferencia finita central:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{x+h - (x-h)} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \quad (3.9)$$

y la diferencia finita por la derecha:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{x+h - (x)} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (3.10)$$

Podemos evaluar la cantidad de error al realizar una expansión en series de Taylor:

$$f(x \pm \Delta x) = f(x) \pm hf'(x) + \frac{(h)^2}{2}f''(x) \pm \frac{(h)^3}{6}f'''(x) + \frac{(h)^4}{24}f''''(x) \pm \dots, \quad (3.11)$$

y a partir de la última expresión podemos encontrar la derivada de una función $f(x)$ considerando una diferencia central:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{(h)^2}{6}f'''(x) + \dots \quad (3.12)$$

En la última expresión todos los términos a partir de $(h)^2/6$ corresponden al error de nuestra aproximación, esto es, la Ec. (3.9), El cual es de segundo orden (dado por la potencia) y se reduce conforme h se hace muy pequeño. Los errores de las aproximaciones dadas por las Ecs. (3.8) y (3.10) son apenas de primer orden, por lo tanto la aproximación que emplearemos para aplicar el método de FDTD, con el cual estudiaremos el comportamiento de arreglos de NPs metálicas cuando en éstas incide radiación electromagnética en un determinado rango de frecuencias, será diferencias centrales.

3.3. FDTD 1D

El método de FDTD es un método numérico en el cual resolvemos las ecuaciones de Maxwell con dependencia temporal haciendo aproximaciones por medio de diferencias centrales.

Partiendo de las ecuaciones de Maxwell con dependencia temporal:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_0} \nabla \times \mathbf{H}, \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}, \quad (3.14)$$

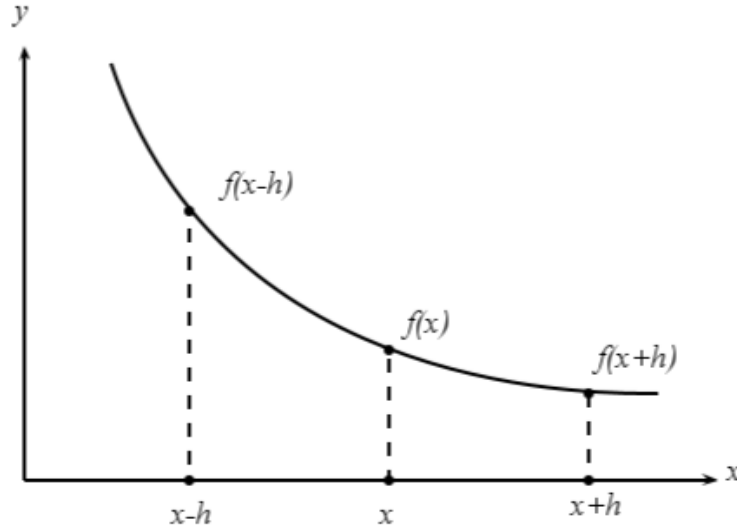


Figura 9: Una función $f(x)$ evaluada en los puntos $x - h$, x y $x + h$.

convertimos nuestras Ecs. (3.13) y (3.14) en unidades gaussianas a partir de la ecuación:

$$\hat{E} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E, \quad (3.15)$$

obteniendo:

$$\frac{\partial \hat{E}}{\partial t} = c (\nabla \times \mathbf{H}), \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -c (\nabla \times \hat{E}), \quad (3.17)$$

donde $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$, es la velocidad de la luz. Desarrollando las Ecs. (3.16) y (3.17) en función de sus componentes cartesianas, llegamos al siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\frac{\partial \hat{E}_x}{\partial t} = c \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial \hat{E}_y}{\partial t} = c \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial \hat{E}_z}{\partial t} = c \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right), \quad (3.20)$$

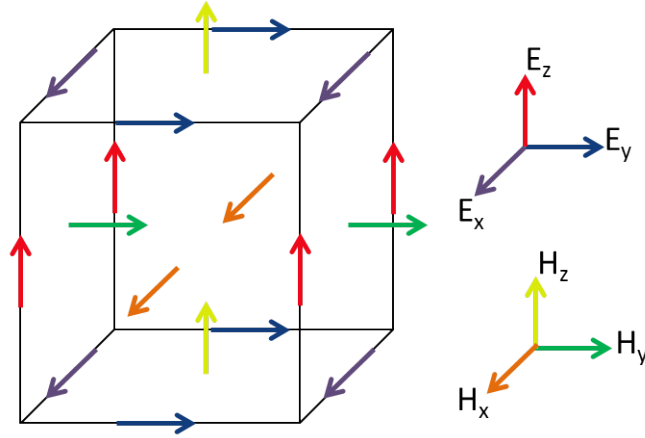


Figura 10: Componentes cartesianas del campo E sobre las aristas de la celda. Del campo H sobre las caras de la celda

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = c \left(\frac{\partial \hat{E}_y}{\partial z} - \frac{\partial \hat{E}_z}{\partial y} \right), \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = c \left(\frac{\partial \hat{E}_z}{\partial x} - \frac{\partial \hat{E}_x}{\partial z} \right), \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = c \left(\frac{\partial \hat{E}_x}{\partial y} - \frac{\partial \hat{E}_y}{\partial x} \right). \quad (3.23)$$

Primero trabajaremos el caso unidimensional, esto es, la onda propagándose en una dirección, y para ello es necesario llevar a cabo una polarización de nuestra onda electromagnética. Vamos a considerar componentes x para el campo eléctrico E , y y para el campo magnético H . De ésta forma del conjunto de Ecs. (3.18)-(3.23) únicamente las Ecs. (3.18) y (3.22) no serán diferentes de cero y tendrán la forma:

$$\frac{\partial \hat{E}_x}{\partial t} = -c \left(\frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -c \left(\frac{\partial \hat{E}_x}{\partial z} \right). \quad (3.25)$$

Nuestro espacio de simulación será una caja dividida en pequeñas celdas en las cuales estarán dispuestos las componentes cartesianas de los campos E y H como se muestra en la Fig. 10.

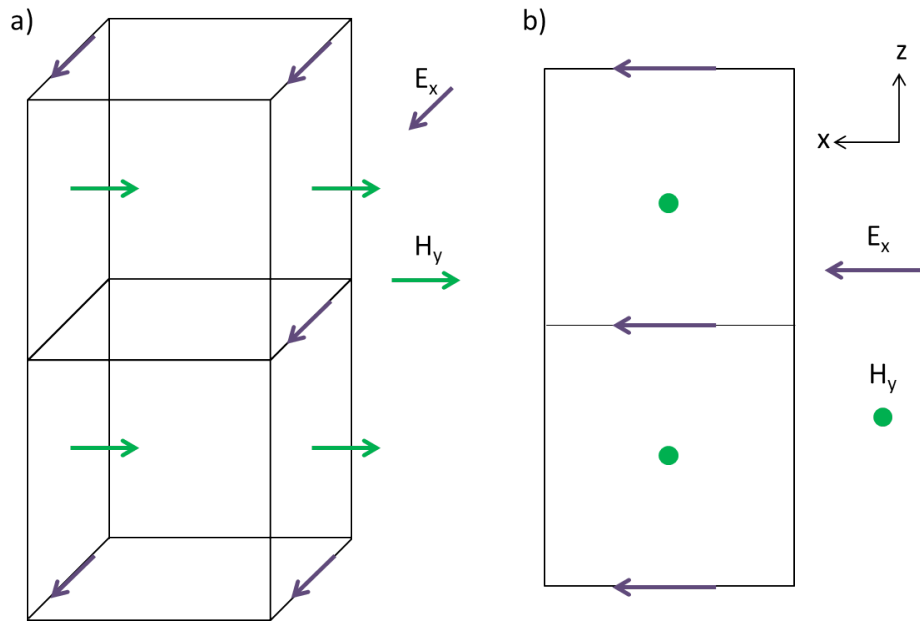


Figura 11: a) Componentes cartesianas E_x y H_y de nuestra onda electromagnética. b) Proyección en el plano xz .

Para el caso unidimensional únicamente contaremos con las componentes E_x y H_y . Nuestra celda será por lo tanto la mostrada en la Fig. 11, donde además se muestra su proyección en el plano yz .

Para realizar la aproximación en diferencias finitas de las Ecs. (3.24) y (3.25) necesitaremos un sistema de índices para las componentes E_x y H_y , esto para poder generar de forma satisfactoria nuestras relaciones de recurrencia que emplearemos al momento de codificar en un lenguaje de programación. El sistema de índices se muestra en la Fig. 12.

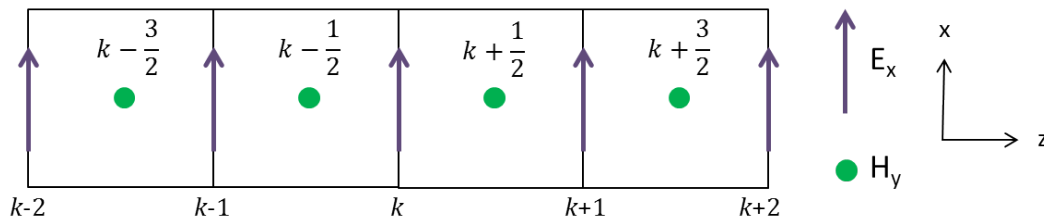


Figura 12: Sistema de índices para las componentes cartesianas E_x y H_y .

Entonces basándonos en la Fig. 4 y empleando el concepto de diferencias finitas dado por la Ec. (3.9), así como superíndices para indicar variaciones temporales,

los cuales serán enteros para variaciones de H_y y semienteros para variaciones de E_x , las Ecs. (3.24) y (3.25) se escriben entonces así:

$$\frac{E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) - E_x^{n-\frac{1}{2}}(k)}{\Delta t} = -c \left[\frac{H_y^n\left(k + \frac{1}{2}\right) - H_y^n\left(k - \frac{1}{2}\right)}{\Delta z} \right], \quad (3.26)$$

$$\frac{H_y^n\left(k + \frac{1}{2}\right) - H_y^n\left(k - \frac{1}{2}\right)}{\Delta t} = -c \left[\frac{E_x^{n+\frac{1}{2}}(k+1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(k)}{\Delta z} \right]. \quad (3.27)$$

Nuestro espacio de simulación estará dividido en pequeñas celdas cúbicas como la que mostramos en la Fig. 10, por lo tanto $\Delta z = \Delta y = \Delta x$. También realizaremos la siguiente parametrización $(c\Delta t/\Delta z) = 0.5$. De esta manera nuestras Ecs. (3.26) y (3.27) tomarán la forma siguiente:

$$E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) = E_x^{n-\frac{1}{2}}(k) - 0.5 \left[H_y^n\left(k + \frac{1}{2}\right) - H_y^n\left(k - \frac{1}{2}\right) \right], \quad (3.28)$$

$$H_y^n\left(k + \frac{1}{2}\right) = H_y^n\left(k - \frac{1}{2}\right) - 0.5 \left[E_x^{n+\frac{1}{2}}(k+1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) \right]. \quad (3.29)$$

Éstas ecuaciones las escribimos en modo de pseudocódigo para poderlas implementar como fórmulas de recurrencia en un lenguaje programación, del modo siguiente:

$$ex(k) = ex(k) + 0.5 [hy(k-1) - hy(k)], \quad (3.30)$$

$$hy(k) = hy(k) + 0.5 [ex(k) - ex(k+1)]. \quad (3.31)$$

Con éstas relaciones de recurrencia nosotros podemos simular una onda electromagnética polarizada en E_x y H_y propagándose en el vacío en una dirección (z).

Después implementamos las condiciones de frontera a nuestro espacio de simulación, estas son del tipo absorbentes y evitan las reflexiones de nuestra onda al incidir en las fronteras. En el caso unidimensional, esto se hace al guardar el valor de $E_x(1)$ durante dos pasos temporales y colocar dicho valor en el arreglo correspondiente a la frontera $E_x(0)$, lo mismo se lleva a cabo en el otro extremo del espacio de simulación, lo anterior es válido debido a la parametrización $(c\Delta t/\Delta z) = 0.5$ mencionada anteriormente y que emplearemos en el programa.

Para simular la interacción de nuestra onda con un material necesitamos reformular las ecuaciones de Maxwell con dependencia temporal empleando el vector desplazamiento eléctrico D :

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \nabla \times H, \quad (3.32)$$

$$D(\omega) = \epsilon_0 \cdot \epsilon_r^* \cdot E(\omega), \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times E. \quad (3.34)$$

Usando la Ec. (3.15) así como la siguiente ecuación:

$$\hat{D} = \sqrt{\frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}} D, \quad (3.35)$$

normalizamos a unidades gaussianas las Ecs. (3.32) y (3.34) para obtener:

$$\frac{\partial \hat{D}}{\partial t} = c (\nabla \times H), \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -c (\nabla \times \hat{E}). \quad (3.37)$$

La Ec. (3.36) es idéntica a la Ec. (3.16) que empleamos en el caso de la onda propagándose en el vacío. De la Ec. (3.33) podemos decir que los vectores campo eléctrico E y desplazamiento eléctrico D son proporcionales, de esta forma, la dirección de éstos vectores en nuestro espacio de simulación es la misma. Siguiendo con la polarización usada en el caso de nuestra onda propagándose en el vacío (D_x y H_y diferentes de cero), el desarrollo de las Ecs. (3.36) y (3.37) nos lleva a:

$$\frac{\partial \hat{D}_x}{\partial t} = -c \left(\frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -c \left(\frac{\partial \hat{D}_x}{\partial z} \right). \quad (3.39)$$

La Fig. 13 nos muestra el sistema de índices que emplearemos para hacer la aproximación en diferencias finitas de las Ecs. (3.38) y (3.39). Dicha aproximación nos lleva a un conjunto de ecuaciones similares a las Ecs. (3.30) y (3.31), listas para ser codificadas:

$$dx(k) = dx(k) + 0.5 \cdot [hy(k-1) - hy(k)], \quad (3.40)$$

$$hy(k) = hy(k) + 0.5 \cdot [ex(k) - ex(k+1)]. \quad (3.41)$$

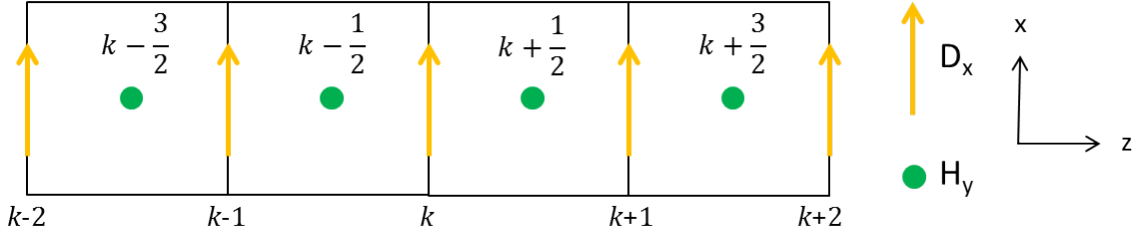


Figura 13: Sistema de índices para las componentes cartesianas D_x y H_y .

Por otro lado, una vez considerada la polarización correspondiente, además de la conversión a unidades gaussianas de la Ec. (3.33), se obtiene:

$$\hat{D}_x(\omega) = \epsilon_r^* \cdot \hat{E}_x(\omega). \quad (3.42)$$

El correspondiente valor de la función dieléctrica ϵ_r^* es el encontrado para el modelo del gas de electrones libres dado por la Ec. (3.5), sustituyendo dicho valor, encontramos:

$$\hat{D}_x(\omega) = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}\right) \hat{E}_x(\omega), \quad (3.43)$$

ecuación que podemos reescribir como:

$$\hat{D}_x(\omega) = \left[1 - \frac{\omega_p^2}{i\omega\gamma} + \frac{\omega_p^2}{i\gamma(\omega + i\gamma)}\right] \hat{E}_x(\omega). \quad (3.44)$$

Podemos llevar esta última ecuación al dominio del tiempo [44] y obtener:

$$D_x(t) = E_x(t) + \frac{\omega_p^2}{\gamma} \int_0^\tau E_x(t') dt' - \frac{2\pi\omega_p^2}{\gamma} \int_0^\tau e^{-\gamma(\tau-t)} E_x(t') dt', \quad (3.45)$$

la discretización de la primera integral nos lleva a la relación:

$$I_x^n = \frac{\omega_p^2}{\gamma} \Delta t E_x^n + I_x^{n-1}, \quad (3.46)$$

y la segunda integral será:

$$S_x^n = \frac{-\omega_p^2}{\gamma} \Delta t E_x^n + e^{-\gamma\Delta t} S_x^{n-1}. \quad (3.47)$$

De la Ec. (3.45) se tenía originalmente lo siguiente:

$$D_x^n = E_x^n + I_x^n + S_x^n, \quad (3.48)$$

si sustituimos los valores obtenidos en Ecs. (3.46) y (3.47) dentro de la Ec. (3.48), podemos obtener la última relación de recurrencia correspondiente a E_x :

$$E_x^n = D_x^n - I_x^{n-1} - e^{-\gamma\Delta t} S_x^{n-1}. \quad (3.49)$$

Ahora escribimos las Ecs. (3.49), (3.46) y (3.47) en pseudocódigo, en el orden mencionado:

$$ex(k) = dx(k) - ix(k-1) - delexp * sx(k-1), \quad (3.50)$$

$$ix(k) = ix(k) + gb(k) * ex(k), \quad (3.51)$$

$$sx(k) = delexp * sx(k) + gc(k) * ex(k), \quad (3.52)$$

donde $gc = -gb$, siendo:

$$gb = \frac{\omega_p^2}{\gamma}, \quad (3.53)$$

y

$$delexp = e^{-\gamma\Delta t}. \quad (3.54)$$

Las Ecs. (3.40), (3.41), (3.50), (3.51) y (3.52) se emplean como fórmulas de recurrencia para simular la interacción de una onda electromagnética y un gas de electrones libres.

3.4. FDTD 2D

Para generar el algoritmo correspondiente a la simulación en dos dimensiones volvemos a basarnos en la celda de Yee (Fig. 2) proyectada en el plano xy . Tendremos una polarización transversal eléctrica (TE); esto es, las componentes de los campos E_z , H_x y H_y son iguales a cero. La propagación de nuestra onda será en las direcciones x , y y . Se presenta un esquema de la malla que se genera en la Fig. 14.

Para encontrar las fórmulas de recurrencia correspondientes a la simulación de una onda electromagnética propagándose en el vacío en dos dimensiones, tomamos el conjunto de Ecs. (3.18)-(3.23) y les aplicamos la polarización TE esto es, E_x , E_y y H_z diferentes de cero, así obtendremos únicamente 3 ecuaciones para trabajar el caso en dos dimensiones.

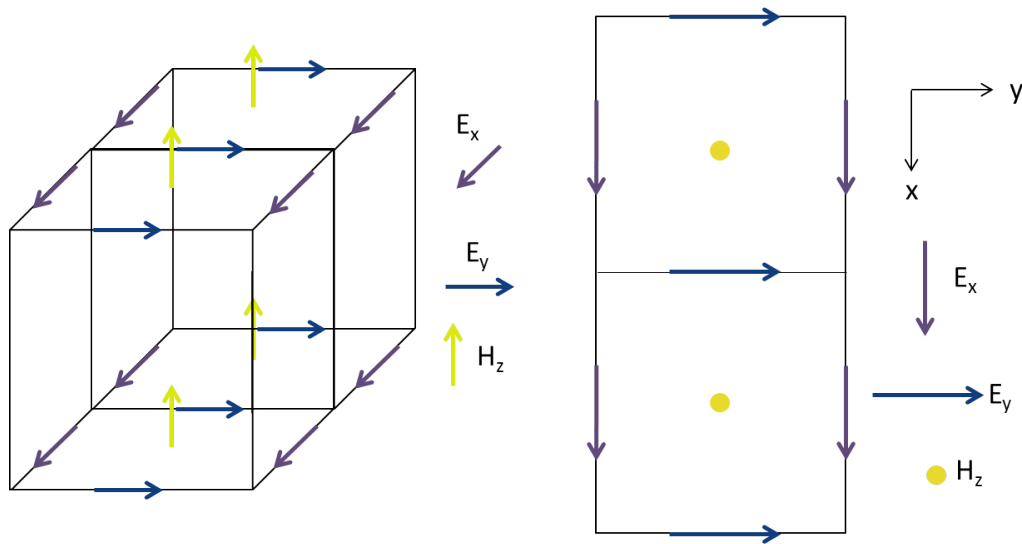


Figura 14: Componentes cartesianas E_x , E_y y H_z de nuestra onda electromagnética y su proyección en el plano xy .

$$\frac{\partial \hat{E}_x}{\partial t} = c \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} \right), \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial \hat{E}_y}{\partial t} = -c \left(\frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = c \left(\frac{\partial \hat{E}_x}{\partial y} - \frac{\partial \hat{E}_y}{\partial x} \right). \quad (3.57)$$

Igual que en caso unidimensional, las Ecs. (3.55)-(3.57) se discretizan por medio de diferencias finitas, empleando el sistema de índices mostrado en la Fig. 15. La discretización de este conjunto de ecuaciones nos arroja los siguientes pseudocódigos:

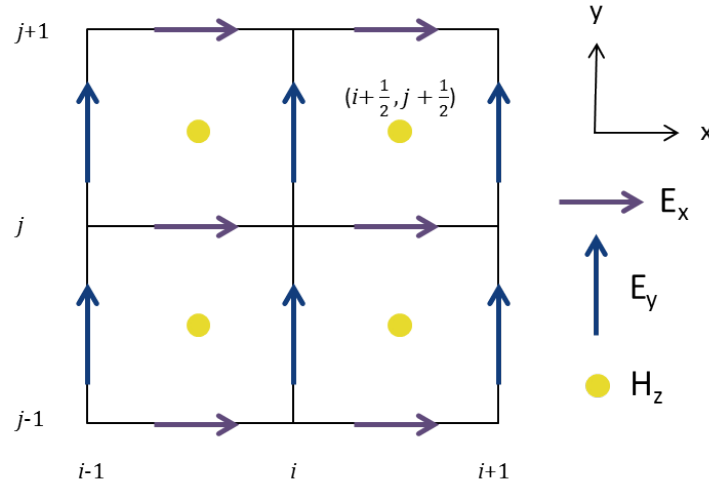


Figura 15: Sistema de índices para las componentes cartesianas E_x , E_y y H_z .

$$ex(i, j) = ex(i, j) + 0.5 \cdot [hz(i, j) - hz(i, j - 1)], \quad (3.58)$$

$$ey(i, j) = ey(i, j) + 0.5 \cdot [hz(i - 1, j) - hz(i, j)], \quad (3.59)$$

$$hz(i, j) = hz(i, j) + 0.5 \cdot [ex(i, j + 1) - ex(i, j - 1) - ey(i + 1, j) + ey(i, j)]. \quad (3.60)$$

A partir de éstas 3 últimas relaciones de recurrencia podemos simular una onda electromagnética propagándose en el plano xy .

Vamos a retomar las Ecs. (3.33), (3.36) y (3.37), esto, al igual que en el caso de una dimensión, para describir la interacción entre la onda electromagnética y algún medio.

Sustituimos las componentes de los campos correspondientes a la polarización TE, esto es, E_x , E_y y H_z , en las ecuaciones antes mencionadas. Del desarrollo de la Ec. (3.36) obtenemos:

$$\frac{\partial D_x}{\partial t} = c \frac{\partial H_z}{\partial y}, \quad (3.61)$$

$$\frac{\partial D_y}{\partial t} = -c \frac{\partial H_z}{\partial x}. \quad (3.62)$$

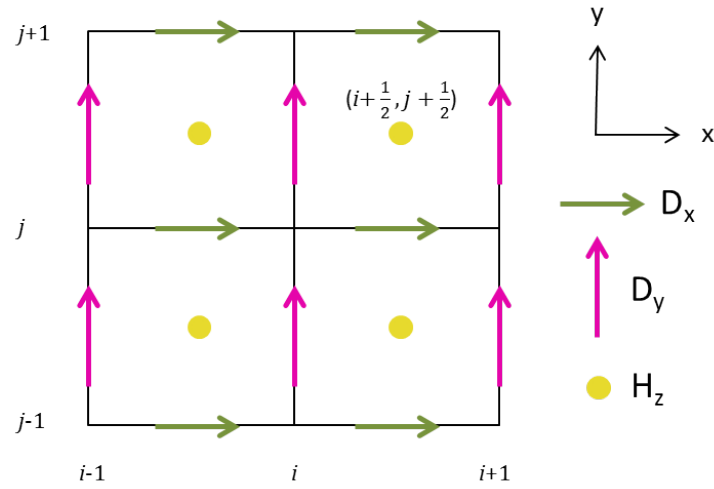


Figura 16: Sistema de índices para las componentes cartesianas D_x , D_y y H_z .

Mientras de la Ec. (3.37) obtenemos:

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = c \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right). \quad (3.63)$$

Finalmente la Ec. (3.33) normalizada y con polarización TE nos da las siguientes ecuaciones:

$$D_x(\omega) = \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} E_x(\omega), \quad (3.64)$$

$$D_y(\omega) = \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} E_y(\omega). \quad (3.65)$$

Las Ecs. (3.61), (3.62) y (3.63) se discretizan aproximando las derivadas por medio de diferencias centrales y basados en el esquema de índices mostrado en la Fig. 16 y llegamos a:

$$D_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j \right) = D_x^{n-\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j \right) + \frac{1}{2} \cdot \left[H_z^n \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} \right) - H_z^n \left(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (3.66)$$

$$D_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2} \right) = D_y^{n-\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \left[H_z^n \left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} \right) - H_z^n \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (3.67)$$

$$H_z^{n+1} \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} \right) = H_z^n \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \left[E_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j + 1 \right) - E_x^{n+\frac{1}{2}} \left(i + \frac{1}{2}, j \right) - E_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i + 1, j + \frac{1}{2} \right) + E_y^{n+\frac{1}{2}} \left(i, j + \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (3.68)$$

Las últimas tres ecuaciones escritas en pseudocódigo nos arrojan lo siguiente:

$$dx(i, j) = dx(i, j) + 0.5 [hz(i, j) - hz(i, j - 1)], \quad (3.69)$$

$$dy(i, j) = dy(i, j) + 0.5 [hz(i - 1, j) - hz(i, j)], \quad (3.70)$$

$$hz(i, j) = hz(i, j) + 0.5 [ex(i, j + 1) - ex(i, j) - ey(i + 1, j) + ey(i, j)]. \quad (3.71)$$

La ecuación (3.64) se desarrolló para el caso unidimensional mientras la ecuación (3.65) lleva un desarrollo idéntico como se muestra a continuación:

$$ey(i, j) = dy(i, j) - ix(i - 1, j - 1) - delexp * sx(i - 1, j - 1), \quad (3.72)$$

$$iy(i, j) = iy(i, j) + gby(i, j) * ey(i, j), \quad (3.73)$$

$$sy(i, j) = delexp * sy(i, j) + gcy(i, j) * ey(i, j). \quad (3.74)$$

A partir de los pseudocódigos en dos dimensiones podemos generar una onda electromagnética con polarización TE que se propaga en el plano xy . Usando las ecuaciones del vector desplazamiento eléctrico \mathbf{D} dependientes de la frecuencia (Ec. (3.33)) es que logramos colocar materiales con características metálicas en nuestro

espacio de simulación.

Estamos simulando una onda gaussiana que se propaga en el espacio libre, y que interacciona con partículas metálicas, nuestra onda llegará al borde del espacio permitido, el cual se determina por la manera en que los arreglos han sido dimensionalizados en nuestro programa. Al llegar a las fronteras la onda es reflejada completamente comenzando una interferencia con la onda que aun sigue dentro de nuestro sistema de simulación. Este ha sido siempre un problema cuando la FDTD ha sido usada. Existen muchas aproximaciones a este problema [45,46].

Una de las ABCs más flexibles y eficientes son las capas perfectamente adaptadas (PML por sus siglas en inglés) desarrolladas por Berenger [47]. La idea básica es: si la onda se propaga en un medio A y esta incide sobre un medio B, la cantidad de reflexión está determinada por las impedancias intrínsecas de los dos medios:

$$\Gamma = \frac{\eta_A - \eta_B}{\eta_A + \eta_B}, \quad (3.75)$$

las cuales son determinadas por las constantes dieléctricas y permeabilidades de los dos medios:

$$\eta = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}. \quad (3.76)$$

si μ cambia con ϵ , η permanece constante, y Γ sería cero, por lo que no habría reflexión alguna.

Esto todavía no resuelve el problema, ya que el pulso continuaría propagándose en el medio nuevo. Lo que realmente se quiere es un medio de tal manera que el pulso muera antes de llegar a la frontera. Esto se logra haciendo ϵ y μ de la Ec. (3.76) complejas, debido a que la parte imaginaria representa la parte que causa el decaimiento. Un esquema de nuestro espacio de simulación y de las PML's se muestra en la Fig. 17 Las Ecs. (3.61), (3.62) y (3.63) las movemos al dominio de Fourier, las Ecs. (3.64) y (3.65) ya están en el dominio de la frecuencia por lo que así las usaremos. Además se adicionan constantes dieléctricas y permeabilidades ficticias $\mu_{F_z}^*$, $\epsilon_{F_x}^*$, $\epsilon_{F_y}^*$ para implementar las PMLs:

$$j\omega D_x \epsilon_{F_x}^*(x) \epsilon_{F_x}^*(y) = c \frac{\partial H_z}{\partial y}, \quad (3.77)$$

$$j\omega D_y \epsilon_{F_y}^*(x) \epsilon_{F_y}^*(y) = -c \frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad (3.78)$$

Finalmente de la Ec. (3.63) obtenemos:

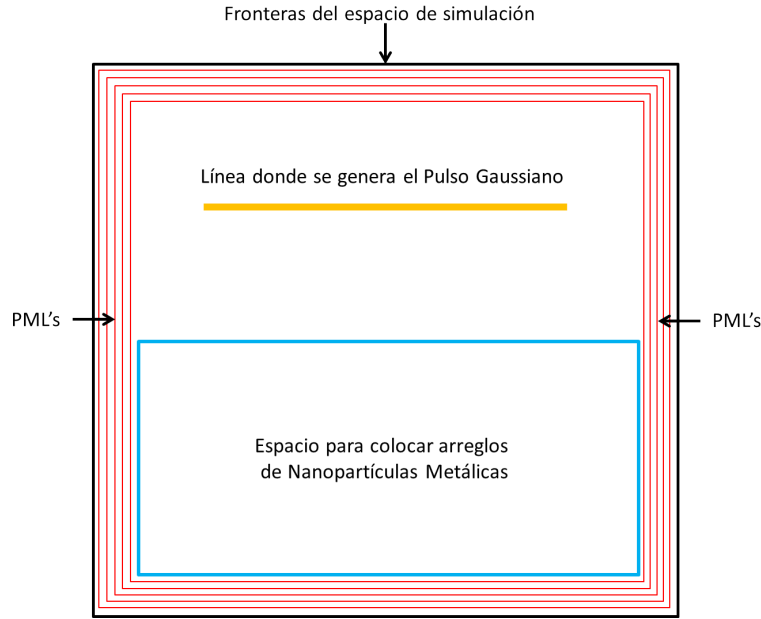


Figura 17: Esquema de los elementos de nuestro espacio de simulación en dos dimensiones.

$$j\omega H_z \mu_{F_z}^*(x) \mu_{F_z}^*(y) = c \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right). \quad (3.79)$$

Sacks *et al.* [48] mostraron que hay dos condiciones para formar una PML:

1.- La impedancia que va del medio de fondo a la PML debe ser constante:

$$\eta_o = \eta_m = \sqrt{\frac{\mu_{F_x}^*}{\epsilon_{F_x}^*}} = 1. \quad (3.80)$$

2.- En la dirección perpendicular a la frontera la constante dieléctrica relativa y la permeabilidad relativa deben ser los inversos de aquellos en la otra dirección.

$$\epsilon_{F_x}^* = \frac{1}{\epsilon_{F_y}^*}, \quad (3.81)$$

$$\mu_{F_x}^* = \frac{1}{\mu_{F_y}^*}. \quad (3.82)$$

Asumiendo un carácter complejo de las Ecs. (3.81) y (3.82):

$$\epsilon_{F_m}^* = \epsilon_{F_m} + \frac{\sigma_{D_m}}{j\omega\epsilon_0}, \quad (3.83)$$

$$\mu_{F_m}^* = \mu_{F_m} + \frac{\sigma_{D_m}}{j\omega\mu_0}. \quad (3.84)$$

donde el subíndice $m = x$ o y , en las Ecs. (3.83) y (3.84). Seleccionando los siguientes parámetros:

$$\epsilon_{F_m} = \mu_{F_m} = 1, \quad (3.85)$$

$$\frac{\sigma_{D_m}}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_{H_m}}{\mu_0} = \frac{\sigma_D}{\epsilon_0}, \quad (3.86)$$

sustituyendo las Ecs. (3.85) y (3.86) en las Ecs. (3.83) y (3.84) logramos que se cumpla la condición 1, esto es, Ec. (3.80).

Llevaremos a cabo la implementación de una PML en la dirección x . de las Ecs. (3.77)(3.78) y (3.79) tendremos:

$$j\omega D_x \epsilon_{F_x}^* (x) = c \frac{\partial H_z}{\partial y}, \quad (3.87)$$

$$j\omega D_y \epsilon_{F_y}^* (x) = -c \frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad (3.88)$$

$$j\omega H_z \mu_{F_z}^* (x) = c \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right). \quad (3.89)$$

De las condiciones (3.84)-(3.86) las ecuaciones anteriores se transforman a:

$$j\omega D_x \left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{j\omega\epsilon_0} \right)^{-1} = c \frac{\partial H_z}{\partial y}, \quad (3.90)$$

$$j\omega D_y \left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{j\omega\epsilon_0} \right) = -c \frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad (3.91)$$

$$j\omega H_z \left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{j\omega\epsilon_0} \right) = c \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right), \quad (3.92)$$

el lado izquierdo de la ecuación (3.92) lo podemos escribir de la siguiente forma:

$$j\omega H_z \left(1 + \frac{\sigma_D(x)}{j\omega\epsilon_0} \right) = j\omega H_z + \frac{\sigma_D(x)}{\epsilon_0} H_z. \quad (3.93)$$

Regresando al dominio temporal y haciendo la aproximación en diferencias finitas así como empleando el sistema de índices de la Fig. 16 llegamos a:

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} + \frac{\sigma_D(x)}{\epsilon_0} H_z = \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right) - H_z^{n-\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right)}{\Delta t} + \frac{\sigma_D(i)}{\epsilon_0} \left[\frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right) - H_z^{n-\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right)}{2} \right], \quad (3.94)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} + \frac{\sigma_D(x)}{\epsilon_0} H_z = \frac{H_z^{n+1}\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right)}{\Delta t} \left(1 + \frac{\sigma_D(i) \Delta t}{2\epsilon_0}\right) - \frac{H_z^n\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}\right)}{\Delta t} \left(1 - \frac{\sigma_D(i) \Delta t}{2\epsilon_0}\right). \quad (3.95)$$

Sustituyendo en la Ec. (3.92) y aproximando el lado derecho de ésta por diferencias finitas tendremos:

$$\frac{H_z^{n+1}(i, j)}{\Delta t} \left(1 + \frac{\sigma_D(i) \Delta t}{2\epsilon_0}\right) - \frac{H_z^n(i, j)}{\Delta t} \left(1 - \frac{\sigma_D(i) \Delta t}{2\epsilon_0}\right) = \frac{c}{\Delta x} \left[E_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j+1\right) - E_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j\right) - E_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i+1, j+\frac{1}{2}\right) + E_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j+\frac{1}{2}\right) \right], \quad (3.96)$$

de donde obtenemos finalmente nuestra ecuación de recurrencia:

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j) = g_{i3}(i) \cdot H_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j) + 0.5 \cdot g_{i2}(i) \left[E_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j+\frac{1}{2}\right) - E_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j-\frac{1}{2}\right) - E_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j\right) + E_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i-\frac{1}{2}, j\right) \right], \quad (3.97)$$

con:

$$g_{i3}(i) = \frac{1 - \frac{\sigma_D(i)\Delta t}{2\epsilon_0}}{1 + \frac{\sigma_D(i)\Delta t}{2\epsilon_0}}, \quad (3.98)$$

$$g_{i2}(i) = \frac{1}{1 + \frac{\sigma_D(i)\Delta t}{2\epsilon_0}}. \quad (3.99)$$

Ahora trabajamos de la misma forma las Ecs. (3.90) y (3.91), cambiándolas al dominio temporal. Logrando satisfacer los requerimientos mencionados para tener una PML. Si σ incrementa gradualmente mientras entra en la PML, las Ecs. (3.90), (3.91) y (3.92) causarán que D_x , D_y y H_z sean atenuadas.

Capítulo 4

Resultados

4.1. FDTD 1D

Los resultados presentados para el caso unidimensional se llevaron a cabo en un espacio de simulación de 5000 unidades, durante un tiempo de 1000 unidades. Cada unidad espacial corresponde a 2.142 nm . Las unidades temporales son de $9.52 \times 10^{-18} \text{ seg}$. Nuestra Onda se genera en las 1250 unidades que corresponde a $2.67 \text{ }\mu\text{m}$. y se propaga en las direcciones positiva y negativa de z .

Con los parámetros mencionados en el párrafo anterior, generamos una Onda Gaussiana atenuada por una función sinusoidal en un rango de longitudes de onda de 150 a 900 nm , el cual comprende la región del espectro ultravioleta cercano, pasando por el visible y hasta una porción del infrarrojo cercano. Dicha onda se propaga en un espacio de simulación de longitud igual a $10.37 \text{ }\mu\text{m}$. La Fig. 18 nos muestra el campo E_x de una onda electromagnética cuya longitud de onda es de 550 nm , propagándose en el vacío a diferentes unidades de tiempo.

En los incisos b) y d) de la Fig. 18 vemos como Nuestra onda se refleja completamente al incidir en las fronteras generando máximos de interferencia. La onda se propaga sin ningún problema en el vacío.

La Fig. 19 nos muestra una onda generada con los mismos parámetros que la onda de la Fig. 18, solo que ahora con la implementación de condiciones de frontera de tipo absorbentes. Podemos observar que la onda desaparece ó se absorbe una vez que incide en las fronteras, la absorción de la onda es completa, no manifiesta la más mínima refelexión.

En la Fig. 20 tenemos una onda generada a partir de las mismas condiciones que las ondas de las Figs. (18) y (19) con las excepción de la longitud de onda, cuyo valor para esta Figura es de 300 nm . Además se introduce a la mitad del espacio de si-

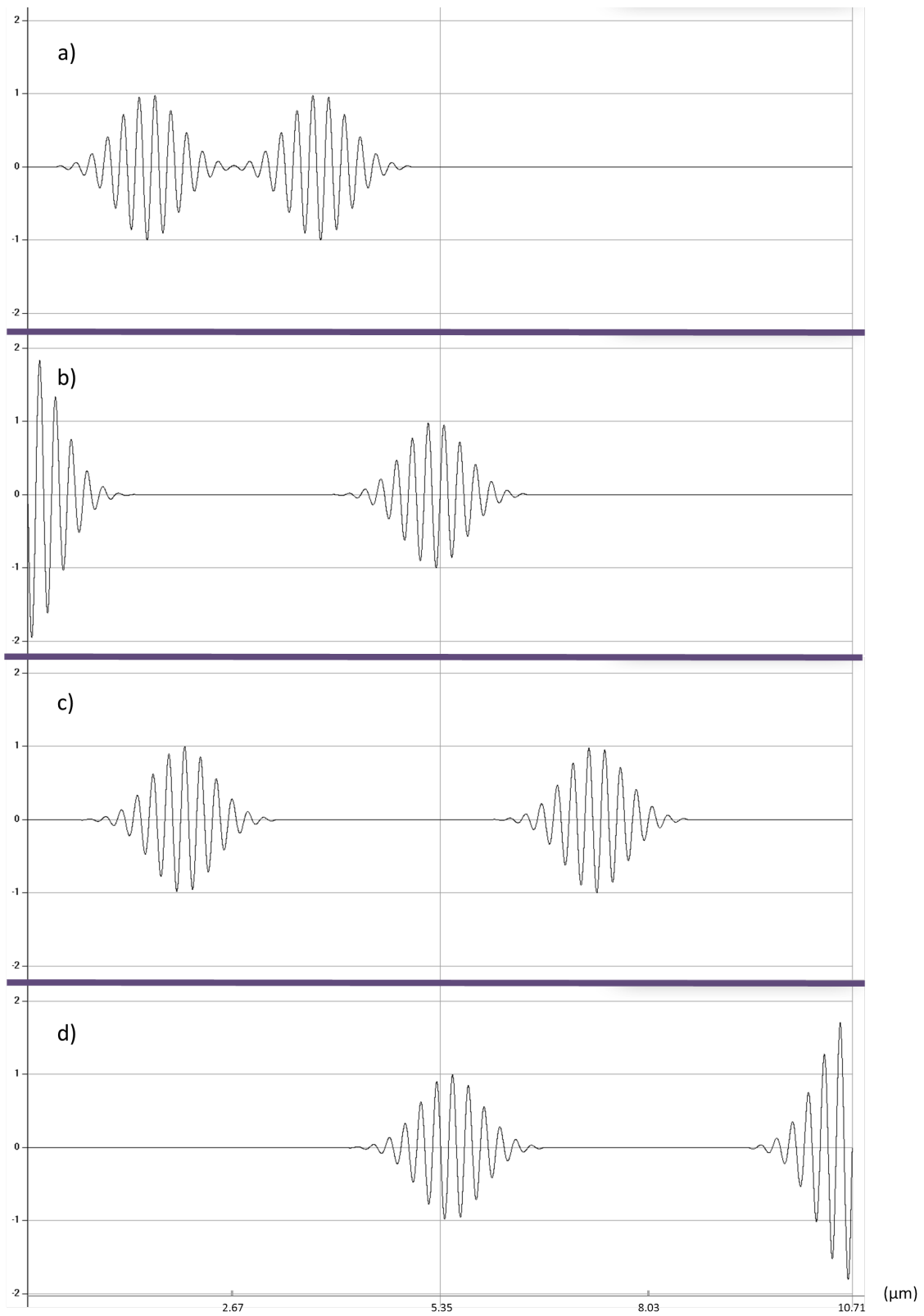


Figura 18: Propagación de E_x en el vacío sin condiciones de frontera. a) $t=215u$ b) $t=355u$ c) $t=550u$ d) $t=875u$.

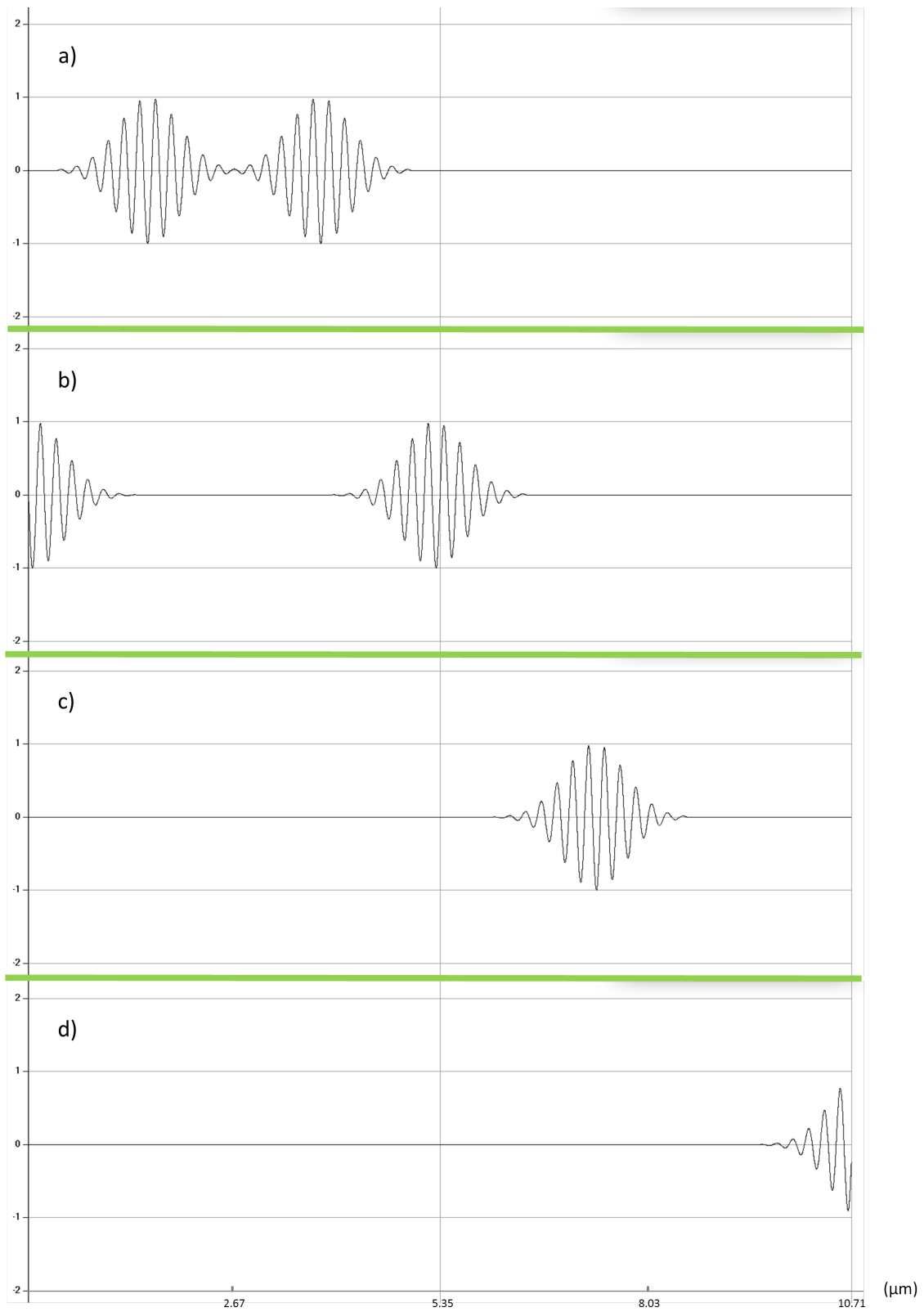


Figura 19: Propagación de E_x en el vacío sin condiciones de frontera. a) $t=215u$ b) $t=355u$ c) $t=550u$ d) $t=875u$.

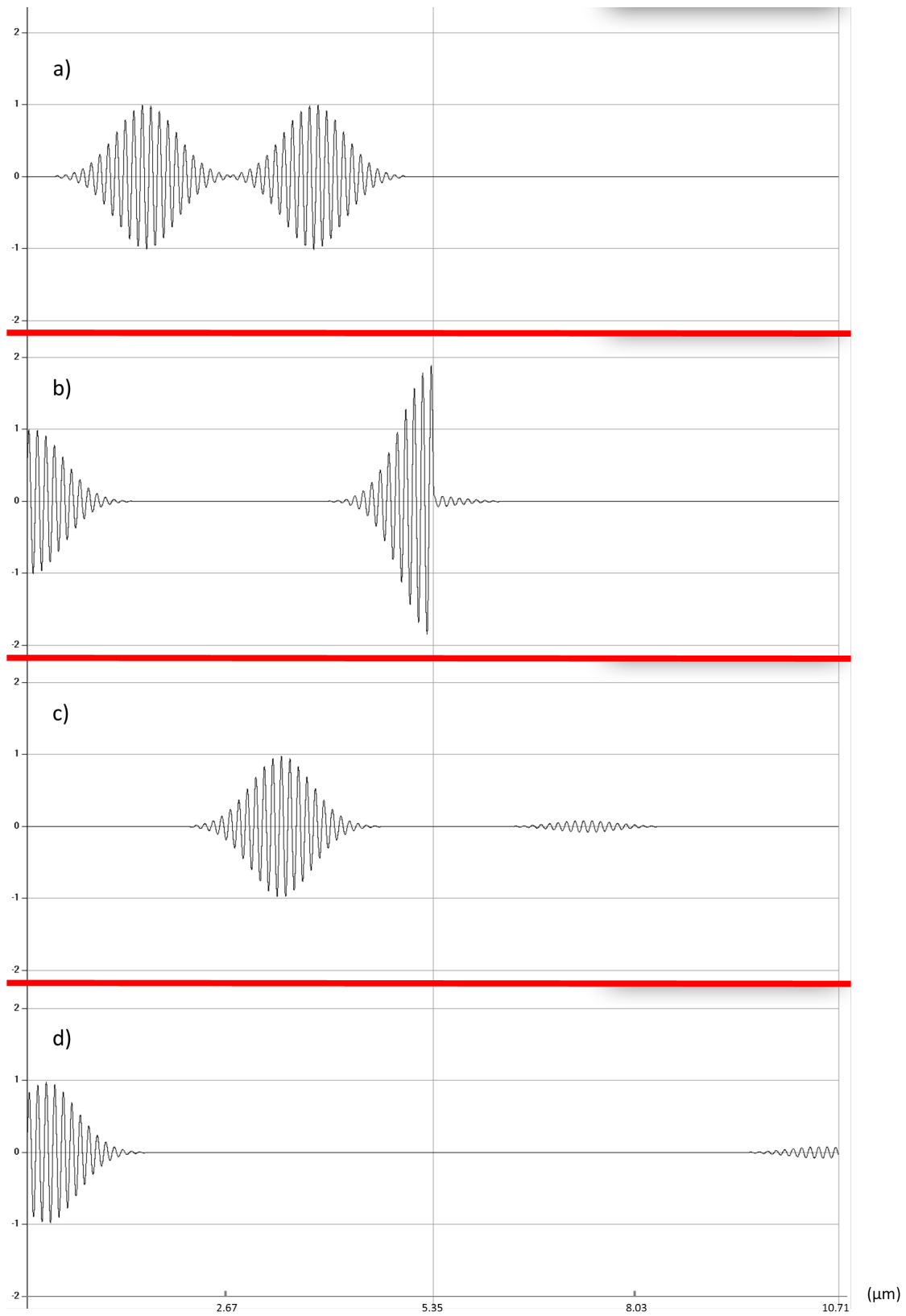


Figura 20: Pulso Gaussiano propagándose en el vacío sin condiciones de frontera y a diferente tiempos de simulación. a) $t=20u$ b) $t=70u$ c) $t=112u$ d) $t=160u$.

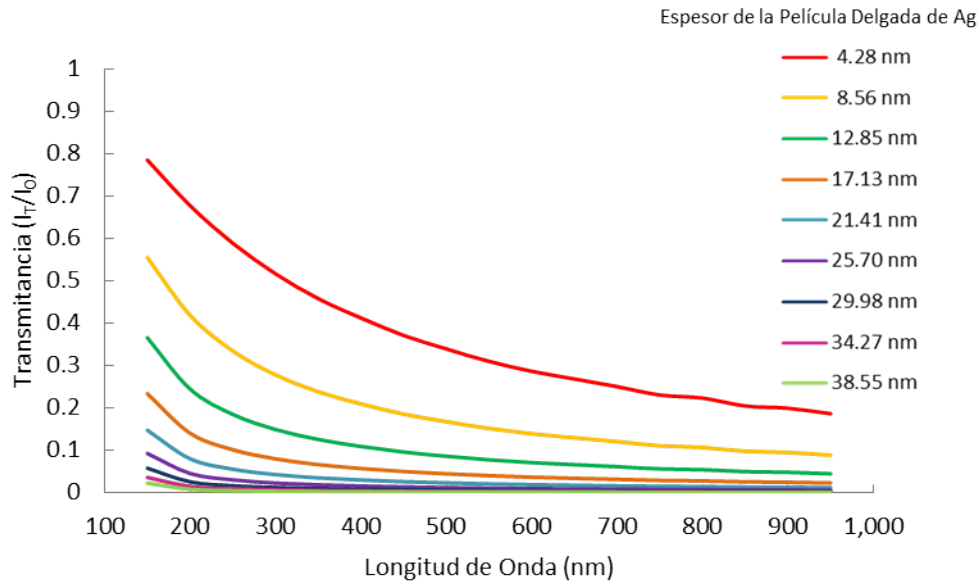


Figura 21: Transmitancia contra Longitud de onda para películas de plata de diferente espesor.

mulación, una película delgada de plata con un espesor de 17.13 nm . Se emplearon los siguientes valores para simular que el espacio correspondiente es ocupado por plata: $\omega_p = 1.7601 \times 10^{16} \text{ rad/seg}$. y $\gamma = 3.0841 \times 10^{14} \text{ rad/seg}$ [Ref...LightTrapping]. Podemos observar en b) la interacción entre la onda y la película de plata. En la parte c) vemos tanto la cantidad de onda que ha logrado transmitirse como la que se ha reflejado.

Llevamos a cabo diferentes simulaciones similares a las mostradas en la Fig. 20, en ellas hicimos variaciones en la longitud de onda para un determinado espesor de la película de plata, así como variaciones en el espesor de la película delgada para una longitud de onda fija. Cuantificamos la transmitancia de la película delgada a partir de los máximos de nuestra onda incidente y de nuestra onda transmitida. Las gráficas de las Figs. (21) y (22) nos muestran la transmitancia en función de los parámetros ahí señalados.

En la Fig. 21 observamos que a partir de un espesor de 12.85 nm la transmitancia en la región del visible es menor que 0.10. Conforme nos movemos a la región del Infrarrojo, la transmitancia se pierde completamente. Mientras que en la Fig. 22 las curvas de transmitancia nos señalan que después de un espesor de 20 nm la transmitancia es prácticamente nula después de una longitud de onda de 300 nm . En ambas gráficas las curvas tienen una forma decreciente.

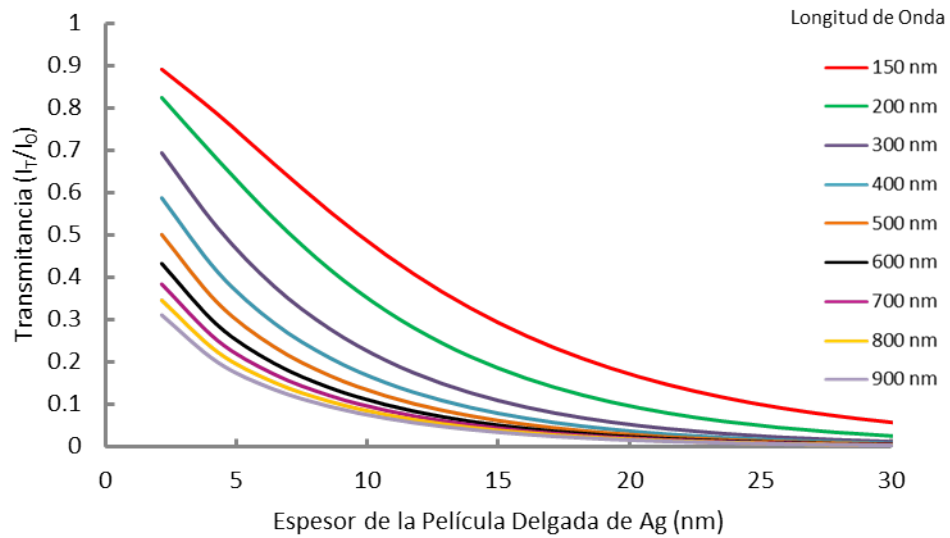


Figura 22: Transmitancia contra Espesor de película para diferentes longitudes de onda.

Podemos comparar nuestro resultados con los de la Fig. 23 donde muestran la transmitancia de una película delgada de plata, además de películas delgadas con diferentes recubrimientos dieléctricos, en la figura podemos apreciar el comportamiento decreciente de la película al incrementar la longitud de onda de la luz incidente, mismo comportamiento que encontramos en nuestras simulaciones para espesores del orden de 25 nm.

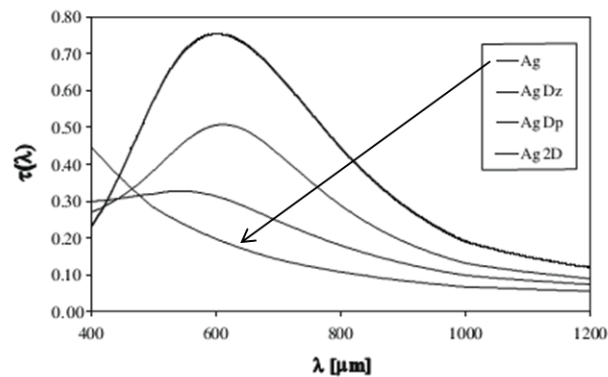


Figura 23: Transmitancia de películas delgadas de plata de 25 nm de espesor con y sin recubrimiento dieléctrico [49].

4.2. FDTD 2D

Para el caso bidimensional, generamos el pulso gaussiano similar al empleado en el caso de una dimensión. La dirección de propagación del pulso es $\pm y$ como podemos observar en la Fig. 24 donde en b) observamos como la onda es perfectamente absorbida al incidir en las PMLs. La Fig. 25 nos muestra nuestro pulso gaussiano en el plano xz . Esta simulación se realizó en un espacio de 400×400 celdas, cada una con longitud igual a 2 nm . Se colocaron en las fronteras 40 PMLs.

El propósito del programa es estudiar la interacción entre nuestro pulso gaussiano (a diferentes longitudes de onda) y NPs o arreglos de éstas colocados estratégicamente en nuestro espacio de simulación, buscamos variar el tamaño y la forma de nuestras NPs. Las geometrías que generamos en nuestro programa fueron: circular, cuadrada y triangular.

Realizamos el cálculo de los puntos en nuestro espacio de simulación en los que existe una mayor concentración de energía después de 2500 pasos temporales, esto a partir de conocer la magnitud del campo eléctrico y el vector de poynting. El rango en el cual se llevo a cabo el cálculo de los puntos con mayor concentración de energía fue 50 a 800 nm . Se introdujeron partículas individuales en forma de círculos con radios de: $20, 36, 50, 66, 80$ y 96 nm , cuadrados con lados igual a: $36, 64, 88, 108, 142$ y 170 nm , además de triángulos isóceles con bases: $70, 126, 178, 234, 282$ y 338 nm y una relación entre la base b y la altura h dada por: $b = 2h - 1$. Empleamos los parámetros para la función dieléctrica de la plata con $\omega_p = 13.673 \times 10^{15} \text{ Hz}$ y $\Gamma = 27.35 \times 10^{12} \text{ Hz}$ [Ref...]. Se emplearon un total de 40 PML's en todas las simulaciones. Es importante señalar que los máximos que presentamos en las Figs. (26)(27)(28) no siempre correspondieron a puntos en los bordes o contorno de nuestra partícula, sin embargo, en la región entre 340 y 380 nm los máximos sí fueron de puntos del contorno de nuestra partícula. No notamos un corrimiento hacia la región del infrarrojo al aumentar el tamaño de nuestra partícula como era de esperarse [Ref...]. Observamos de manera general una mayor dispersión en nuestros resultados cuando el tamaño de la partícula es mayor, por lo que podemos suponer que únicamente para tamaños de partícula pequeños es que esta metodología empleada (intuitiva) puede ser útil.

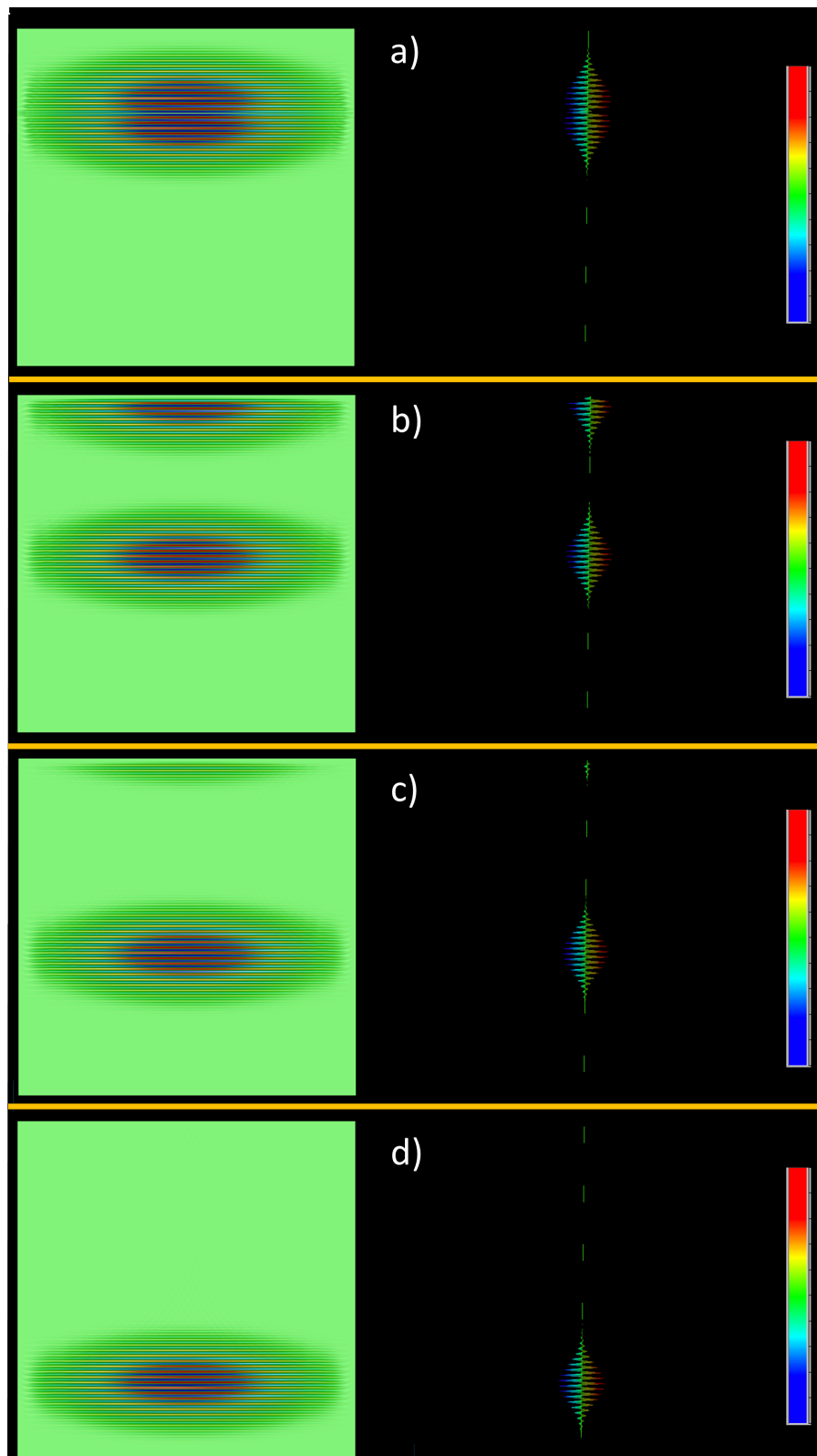


Figura 24: Pulso gaussiano propagándose en el plano xy . a) $t=320$. b) $t=640$. c) $t=800$. d) $t=1120$.

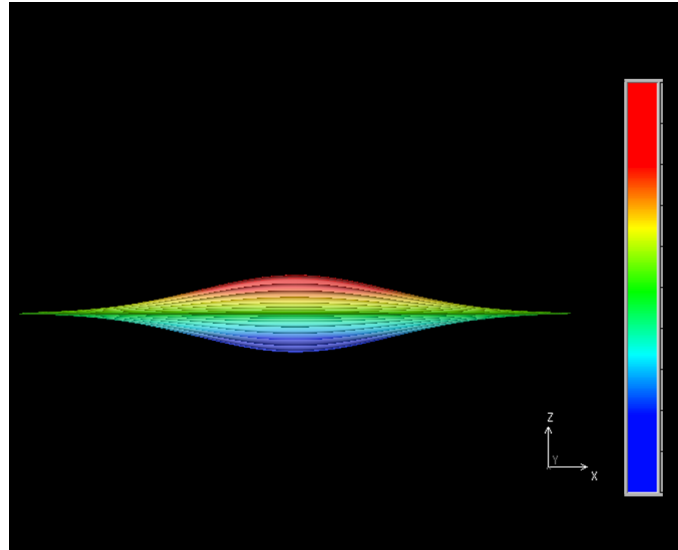


Figura 25: Onda Electromagnética vista en el plano xz para un $t=800$.

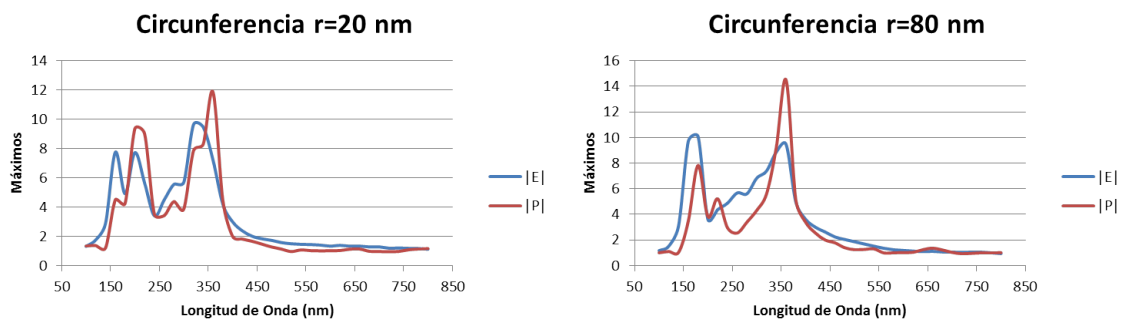


Figura 26: Máximos de la magnitud del campo eléctrico y el vector de poynting contra longitud de onda. Partículas circulares.

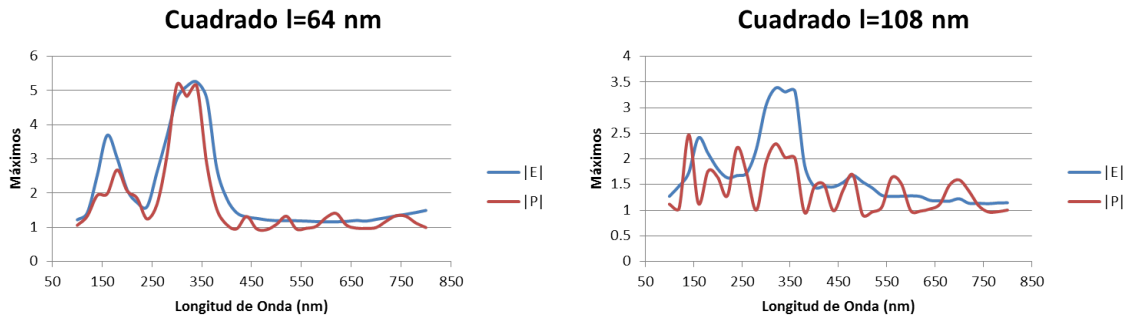


Figura 27: Máximos de la magnitud del campo eléctrico y el vector de poynting contra longitud de onda. Partículas cuadradas.

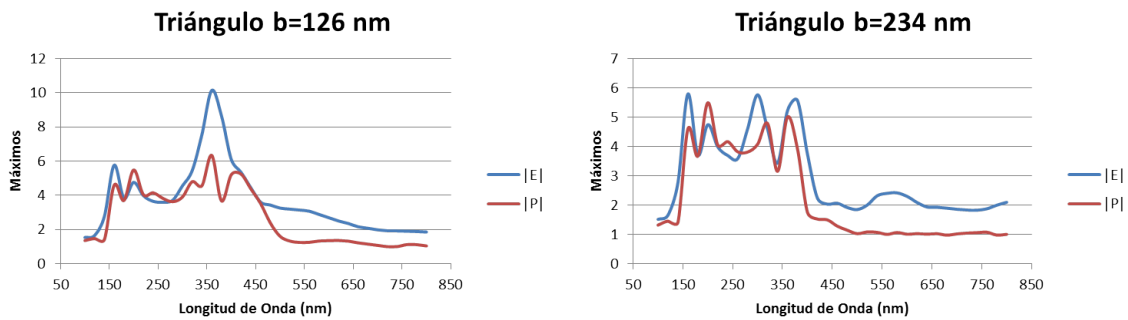


Figura 28: Máximos de la magnitud del campo eléctrico y el vector de poynting contra longitud de onda. Partículas triangulares.

A partir de los puntos de mayor concentración de energía encontrados en cálculos de los gráficos de las Figs. (26), (27) y (28). Se hicieron simulaciones para encontrar los valores máximos de $|E|$ y $|P|$ en éstos puntos específicos del contorno de nuestras NPs, volviéndose a encontrar una preferencia por longitudes de onda alrededor de 360 nm. Obsérvese Figs. (29), (30) y (31).

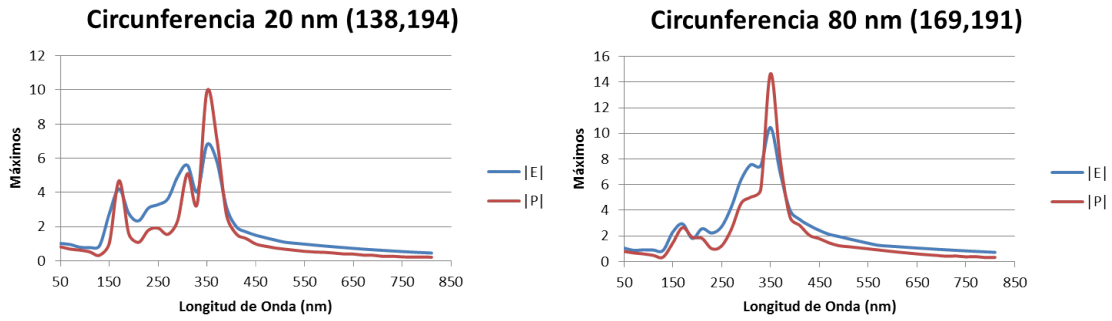


Figura 29: Máximos de la magnitud del campo eléctrico y el vector de poynting contra longitud de onda. Partículas Circulares.

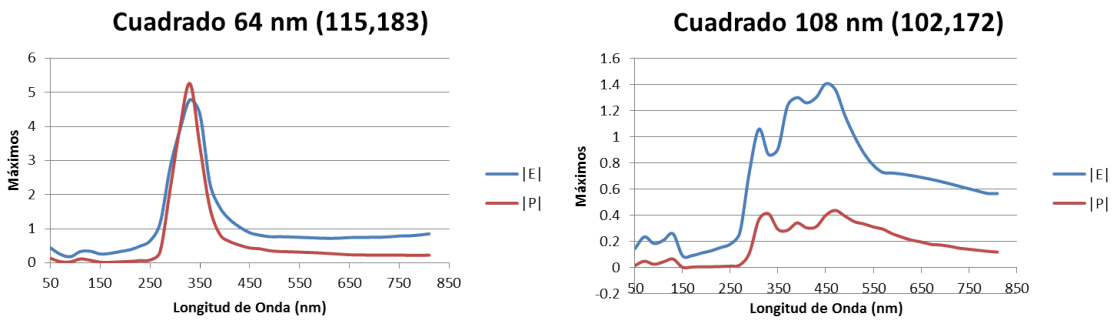


Figura 30: Máximos de la magnitud del campo eléctrico y el vector de poynting contra longitud de onda. Partículas Cuadradas.

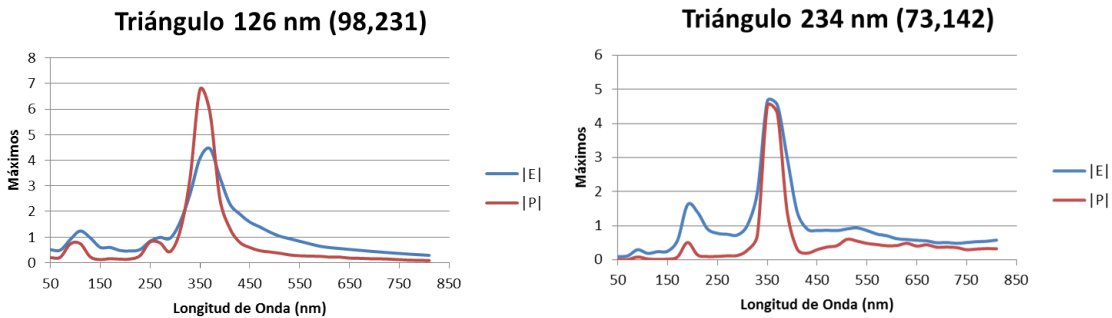


Figura 31: Máximos de la magnitud del campo eléctrico y el vector de poynting contra longitud de onda. Partículas triangulares.

Otro factor que se analizó fué la cantidad de capas que colocamos en las fronteras para ver si existía una posible influencia de éstas en nuestros resultados, fuimos

incrementando el número de capas y se calcularon al igual que en los gráficos anteriores los máximos de $|E|$ y $|P|$. Esto se puede ver en la Fig. 32.

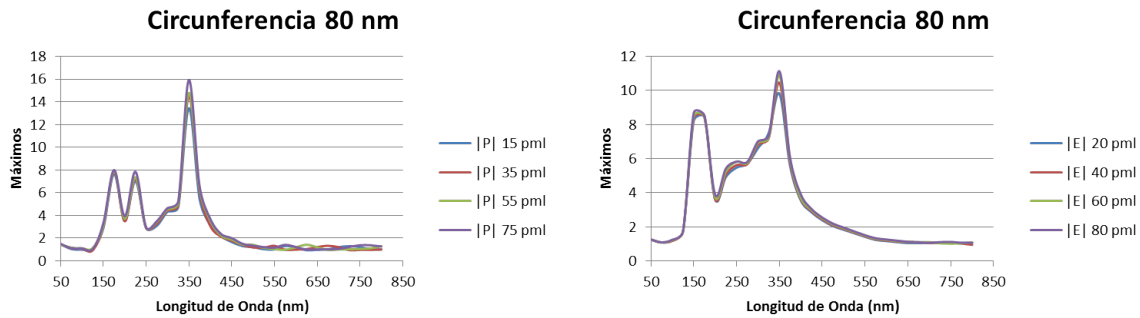


Figura 32: Máximos de la magnitud del campo eléctrico y el vector de poyniting contra longitud de onda para diferente cantidad de PMLs.

Después de notar que no hay aparente influencia de las PMLs en los resultados que pueda arrojarnos el programa, decidimos dejar el valor inicial de PMLs (40), y basándonos en los tamaños de partícula que nos arrojaban máximos de $|E|$ y $|P|$ con poca dispersión y longitudes de onda bien definidas, esto es alrededor de los 360 nm , Realizamos una simulación con incrementos en la longitud de onda de 1 nm dentro de un rango de 340 a 380 nm , donde encontramos los máximos en 356 nm que fué el valor que adoptamos como punto de partida para comenzar con el análisis de la respuesta de una NP a nuestro pulso gaussiano.

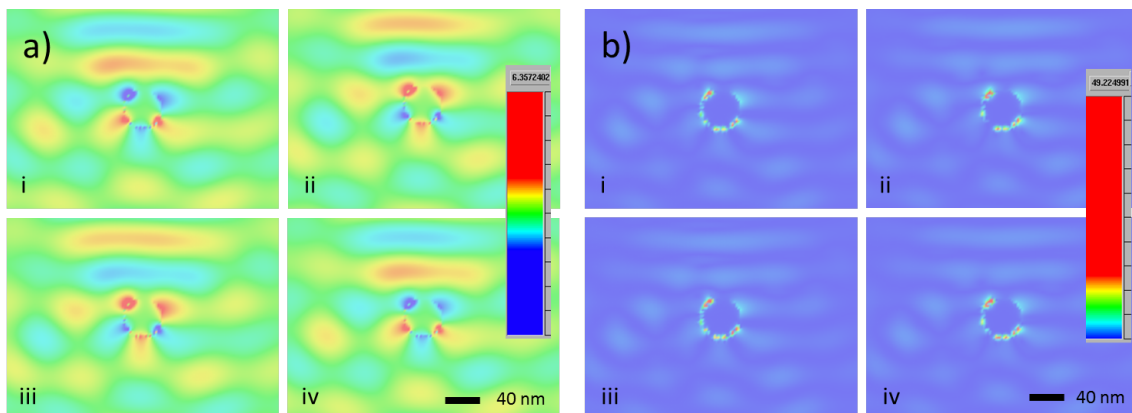


Figura 33: a) Campo H_z y b) $|P|$ para una circunferencia de 20 nm de radio con tiempos, i) $t=33$ ii) $t=35$ iii) $t=42$ iv) $t=44$

Mostramos en las Figs. (33), (34) y (35), la evolución temporal de 3 Nps cuando sobre éstas incide un pulso gaussiano de 356 nm . El campo H_z lo podemos observar

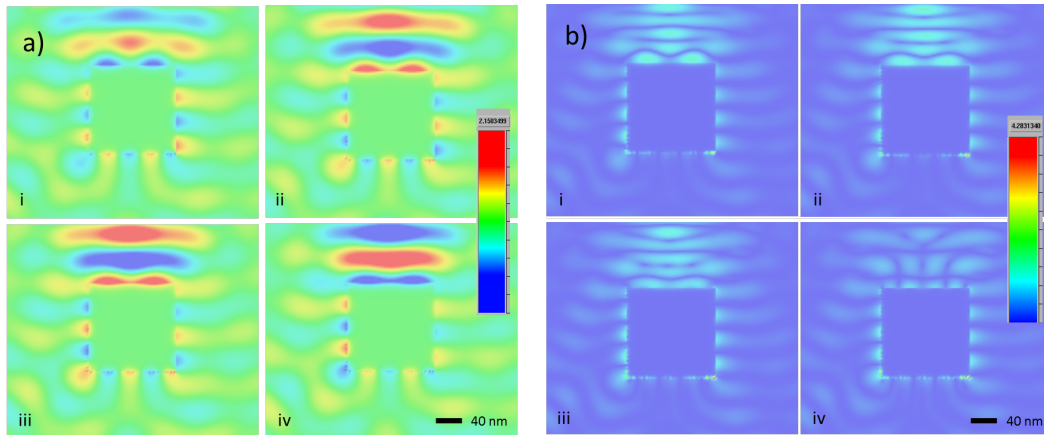


Figura 34: a) Campo H_z y b) $|P|$ para una cuadrado de 108 nm de lado con tiempos, i) $t=24$ ii) $t=26$ iii) $t=37$ iv) $t=39$

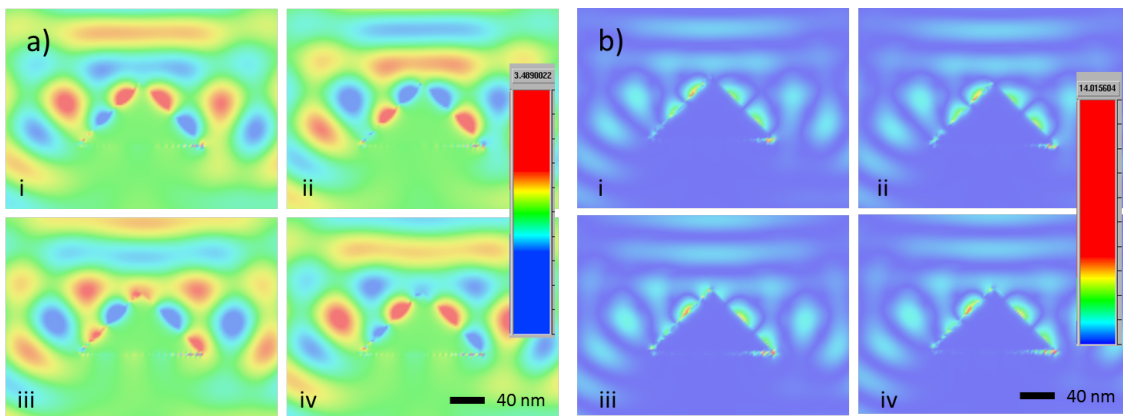


Figura 35: a) Campo H_z y b) $|P|$ para un triángulo de 126 nm de base con tiempos, i) $t=26$ ii) $t=28$ iii) $t=38$ iv) $t=40$

en la parte a) de las Figs., donde se muestran los diversos patrones de interferencia además de una preferencia de dichos patrones por manifestarse en el contorno de las NPs, lo que nos da lugar a pensar en la presencia del fenómeno de plasmón superficial. La $|P|$ se muestra en la parte b) y nos indica la concentración de energía en nuestro espacio de simulación.

En las Figs. (36), (37) y (38) observamos los patrones de interferencia para diferentes longitudes de onda 200, 356, 500, 650 nm, notamos que dichos patrones varían de una longitud de onda a otra. En las Figs. (36) y (37) observamos los patrones de mayor intensidad y acoplamiento en los 356 nm, donde los máximos se encuentran en el contorno de la figura, esto, para el resto de las longitudes de onda las concentraciones de energía en el contorno se dan en una magnitud menor. En la Fig. 38 no podemos afirmar que exista un patrón de interferencia preferencial,

las máximas concentraciones de energía pueden estar entre los 356 y 500 nm , esto tiene sentido ya que se sabe que el aumento de tamaño de una NP conlleva a un acoplamiento con longitudes de onda mayores.

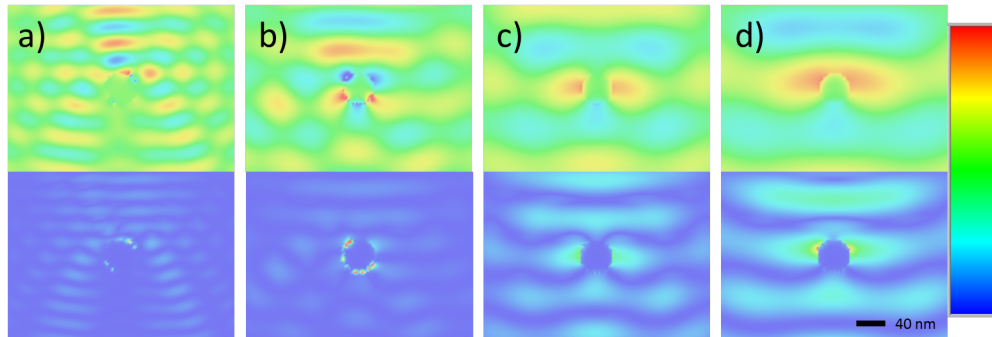


Figura 36: H_z en la parte superior. $|P|$ en la parte inferior, para una circunferencia de 20 nm de radio, con longitudes de onda, a) 200 nm b) 356 nm c) 500 nm d) 650 nm .

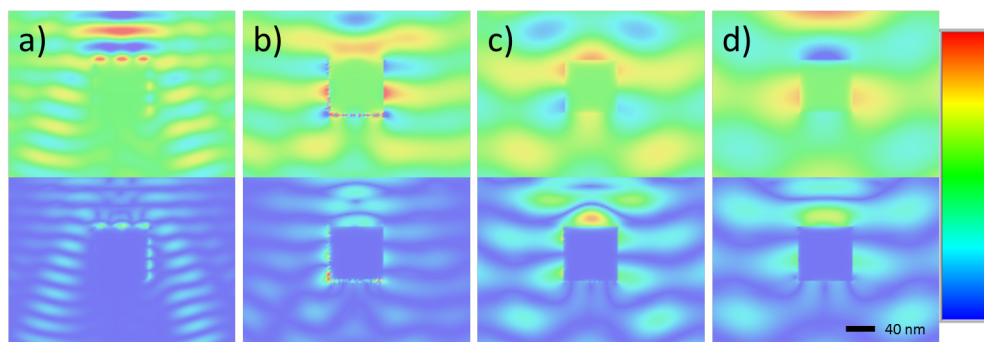


Figura 37: H_z en la parte superior. $|P|$ en la parte inferior, para un cuadrado de 64 nm de lado, con longitudes de onda, a) 200 nm b) 356 nm c) 500 nm d) 650 nm .

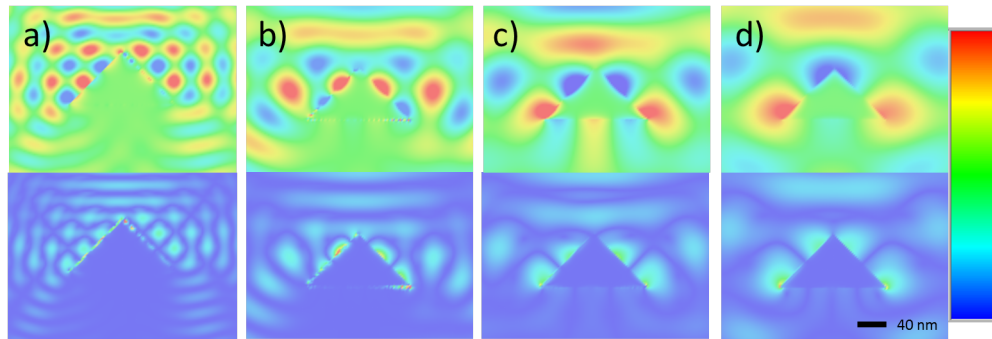


Figura 38: H_z en la parte superior. $|P|$ en la parte inferior, para un triángulo de 126 nm de base, con longitudes de onda, a) 200 nm b) 356 nm c) 500 nm d) 650 nm.

Finalmente mostramos la Fig. 39 donde se mantuvo constante la longitud de onda en 356 nm e incrementamos el radio de nuestra NP con valores de 12, 16, 20, 24, 28, 32, 36 y 40 nm de radio, las NPs que mostraron mayor interacción con nuestro pulso fueron la de 16 y 20 nm, de aquí que podemos validar la afirmación de que la resonancia del plasmón superficial es función tanto del tamaño como de la forma.

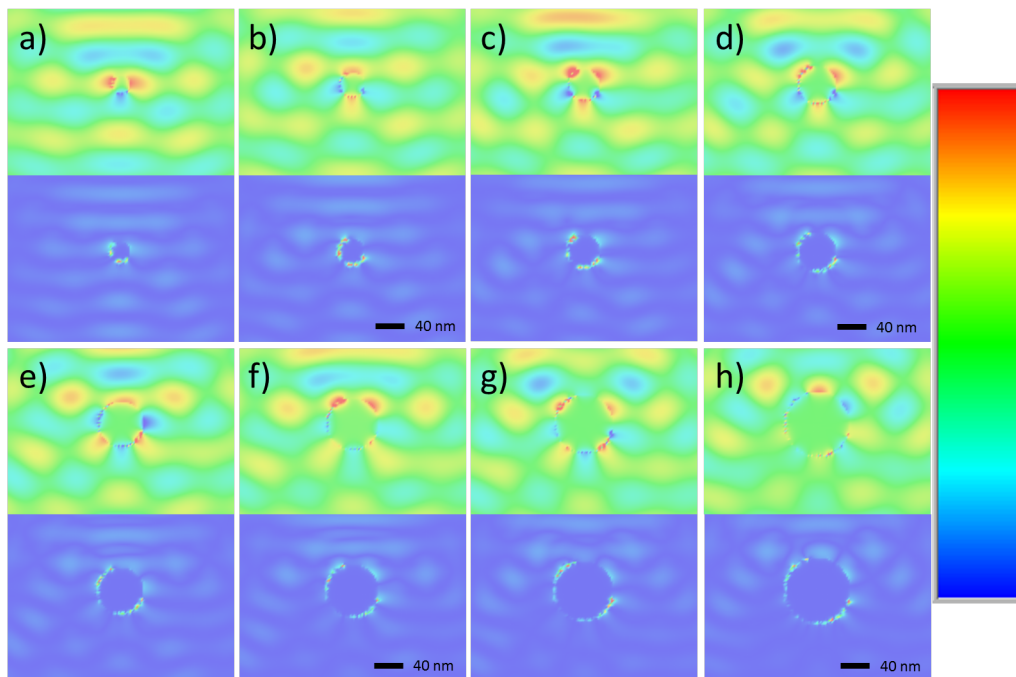


Figura 39: H_z en la parte superior. $|P|$ en la parte inferior, para circunferencias con radios a) 12 nm b) 16 nm c) 20 nm d) 24 nm e) 28 nm f) 32 nm g) 36 nm h) 40 nm, a una longitud de onda de 356 nm.

Capítulo 5

Conclusiones y Perspectivas

5.1. CONCLUSIONES

Se logró codificar de manera correcta la simulación de una onda electromagnética en el vacío y a su vez se puede hacer que ésta tenga interacción con NPs metálicas, estas NPs metálicas pueden tener diferentes geometrías y tamaños. Hasta este momento contamos con un programa en el cual podemos apoyarnos para realizar simulaciones que pueden ser de gran utilidad en el estudio de NPs metálicas y arreglos de éstas, además puede ser un gran complemento para corroborar el trabajo experimental que se llevan a cabo en el grupo de trabajo.

5.2. PERSPECTIVAS

Como trabajo a futuro nos interesa buscar los parámetros óptimos que nos permitan con certeza lograr excitar el Plasmón Superficial en nuestras NPs, además de hacer variaciones o arreglos en las geometrías, por ejemplo las mostradas en la Fig. 40 para reproducir trabajos que estén ya reportados. También es importante estudiar la teoría de Mie para obtener los correspondientes espectros de absorción. Un objetivo importante es llevar a cabo la codificación para simular el fenómeno en tres dimensiones.

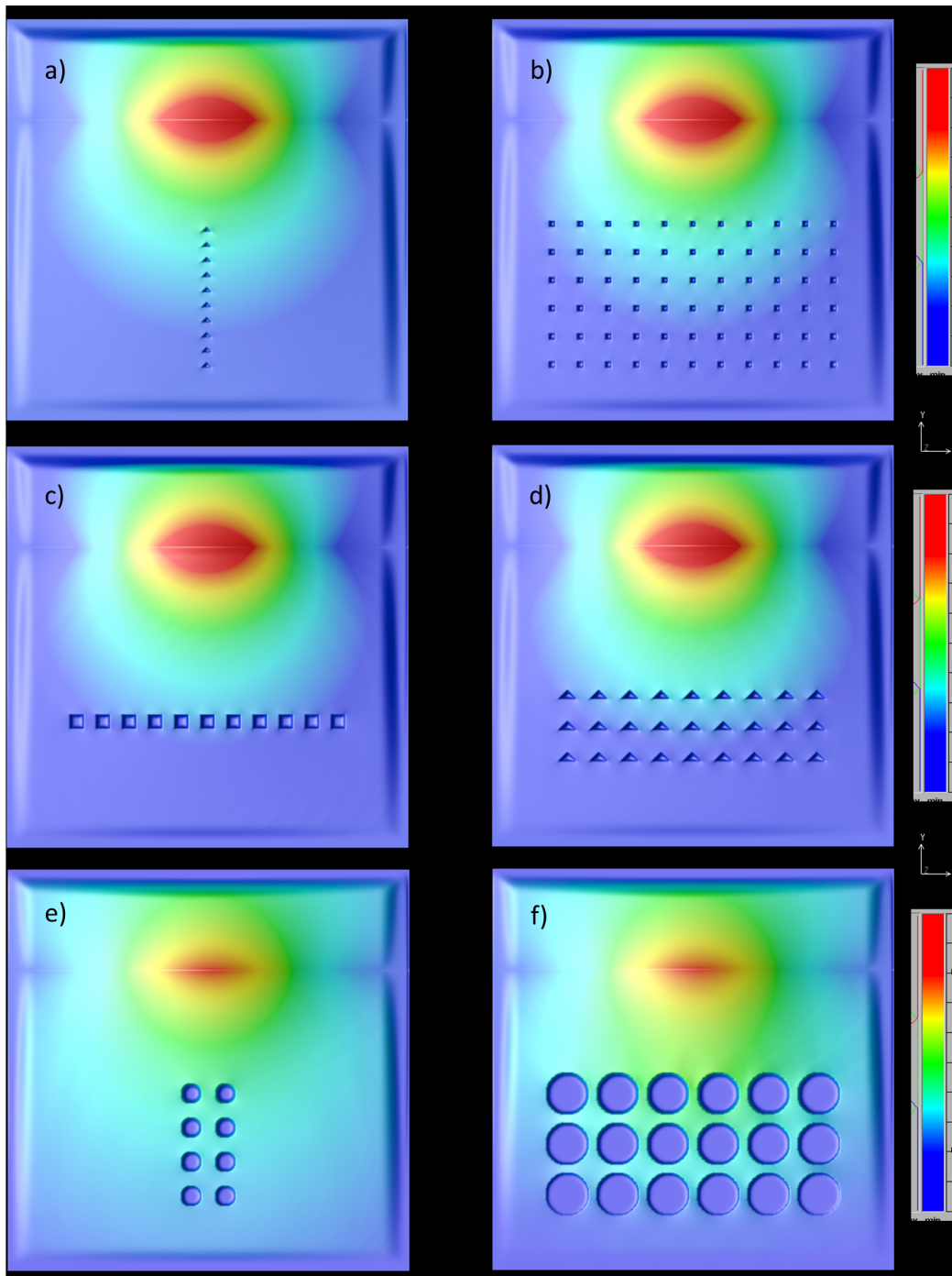


Figura 40: *Diferentes arreglos de NPs generados en el programa.*

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Henglein, A., *J. Phys. Chem.* **97**, 8457 (1993).
- [2] Mulvaney, P., *Langmuir* **12**, 788 (1996).
- [3] Papavassiliou, G. C., *Prog. Solidst. Chem.* **12**, 185 (1980).
- [4] Kerker, M., *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation* (New York: Academic Press, 1969).
- [5] Bohren, C. F., and Huffman, D. R., *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (New York: Wiley, 1983).
- [6] Sarid, D., and Challener, W., *Modern Introduction to Surface Plasmons, Theory, Mathematica Modelling, and Applications* (Cambridge University Press, 2010).
- [7] Schmid, G., *Clusters and Colloids: From Theory to Application* (Weinheim: VCH, 1994).
- [8] Kamat, P. V., and Meisel, D., *Studies in Surface Science and Catalysis, Vol. 103, Semiconductor Nanoclusters-Physical, Chemical, and Catalytic Aspects* (Amsterdam: Elsevier, 1997).
- [9] Edelstein, A. S., and Cammarata, R. C., *Nanoparticles: Synthesis, Properties and Applications* (Bristol: Institute of Physics, 1996).
- [10] Graetzel, M., *Electrochemistry in Colloids and Dispersions, edited by R. A. Mackay and J. Texter* (Weinheim: VCH, 1992).
- [11] Morán-López, J. L., *Comput. Mater. Sci.* **2**, 71 (1994).
- [12] Kreibig, U., and Vollmer, M., *Optical Properties of Metal Clusters* (Berlin: Springer, 1995).
- [13] Kreibig, U., and Genzel, U., *Surf. Sci.* **156**, 678 (1985).
- [14] Alvarez M. M., Khoury, J. T., Schaaff T. G., Shafigullin, M. N., Vezmer, I., and Whetten, R. L., *J. Phys. Chem. B* **101**, 3706 (1997).
- [15] Schaaff T. G., Shafigullin, M. N., Khoury, J. T., Vezmer, I., and Whetten, R. L., Cullen, W. G., First, P. N., Gutierrez-Wing, C., Ascensio, J., and José-Yacamán, M. J., *J. Phys. Chem. B* **101**, 7885 (1997).

- [16] Zhang, Z., Zhang, S. and Xiong, Z., *Plasmonics* **5**, 411 (2010).
- [17] Link, S., and El-Sayed, M. A., *J. Phys. Chem. B* **103**, 4212 (1999).
- [18] Heilweil, E. J., and Hochstrasser, R. M., *J. Chem. Phys.* **82**, 4762 (1985).
- [19] Kreibig, U., Gartz, M., and Hilger, A., *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **101**, 1593 (1997).
- [20] Puech, K., Henari F. Z., Blau, W. J., Duff, D., and Schmid, G., *Chem. Phys. Lett.* **247**, 13 (1995).
- [21] Puech, K., Henari F. Z., Blau, W. J., Duff, D., and Schmid, G., *Europhys. Lett.* **32**, 119 (1995).
- [22] Lamprecht, B., Leitner, A., and Aussenegg, F.R., *Appl. Phys. B* **64**, 269 (1997).
- [23] Lamprecht, B., Krenn, J. R., Leitner, A., and Aussenegg, F.R., *Appl. Phys. B* **69**, 223 (1999).
- [24] Lamprecht, B., Leitner, A., and Aussenegg, F.R., *Appl. Phys. B* **68**, 419 (1999).
- [25] Klar, T., Perner, M., Grosse, S., Von Plessen, G., Spirkl, W., and Feldmann, J., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4249 (1998).
- [26] Link, S., and El-Sayed, M. A., *J. Phys. Chem. B* **103**, 8410 (1999).
- [27] Hostetler, M. J., Wingate, J. E., Zhong, C.-J., Harris, J. E., Vachet, R. W., Clarck, M. R., Londono, J. D., Green, S. J., Stokes, J. J., Wingall, G. D., Glish, G. L., Porter, M. D., Evans, N. D., and Murray, R. W., *Langmuir* **14**, 17 (1998).
- [28] Kreibig, U., and Von Fragstein, C., *Z. Phys.* **224**, 307 (1969).
- [29] Kreibig, U., *Z. Phys.* **234**, 307 (1970).
- [30] Doremus, R. H., *J. Chem. Phys.* **40**, 2389 (1964).
- [31] Doremus, R. H., *J. Chem. Phys.* **42**, 414 (1965).
- [32] Smithard, M. A., *Solid St. Commun.* **14**, 407 (1974).
- [33] Yu, Y., Chang, S., Lee, C., and Wang, C. R. C., *J. Phys. Chem. B* **101**, 6661 (1997).
- [34] Van Der Zande, B. M. I., Bohmer, M. R., Fokkink, L. G. J., and Schonenberger, C., *J. Phys. Chem. B* **101**, 852 (1997).
- [35] Mohamed, M. B., Ismail, K. Z., Link, S., and El-Sayed, M. A., *J. Phys. Chem. B* **102**, 9370 (1998).

- [36] Yin, G., Wang, S., Xu, M. and Chen. L., *J. Korean Phys. Soc.* **49**, 2108 (2006).
- [37] Riboh, J. C.; Haes, A. J.; McFarland, A. D.; Ranjit, C.; Van Duyne, R. P., *J. Phys. Chem. B* **107**, 1772 (2003).
- [38] Shafer-Peltier, K. E.; Haynes, C. L.; Glucksberg, M. R.; Van Duyne, R. P., *J. Am. Chem. Soc.* **125**, 588 (2003).
- [39] Storhoff, J. J.; Elghanian, R.; Mucic, R. C.; Mirkin, C. A.; Letsinger, R. L., *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 1959 (1998).
- [40] Linic, S., Christopher, P., and Ingram, D. V., *Nature Materials* **10**, 911 (2011).
- [41] Yee, K. S., *IEEE Trans. Antennas Propag.* **14**, 302 (1966).
- [42] Katz, D. S., Thiele, E. T., and Taflove, A., *IEEE Microwave Guided Wave Lett.* **4**, 268 (1994).
- [43] Rappaport, C. M., *IEEE Microwave Guided Wave Lett.* **5**, 90 (1995).
- [44] Mayoral-Astorga, L. A., *Óptica de Nanoestructuras Metálicas en Superficies* (Tesis Universidad de Sonora).
- [45] Taflove, A., *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain* (Boston: Artech House, 1995)
- [46] Kunz, K. S., and Luebbers, R. J., *The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics* (Boca Raton, FL: CRC Press, 1993)
- [47] Berenger, J. P., *J. Comput. Phys.* **114**, 185 (1994).
- [48] Sacks, Z. S., Kingsland, D. M., Lee, R. and Lee, J. F. *IEEE Trans. Anten. and Prop.* **43**, 1460 (1995).
- [49] Mohelnikova, J., *Construction and Building Materials* **23**, 1993 (2009).