

# Trabajo de Grado Maestría en Ciencias Física



Determinación numérica de las longitudes de onda de operación de un sensor óptico basado en la Resonancia de Plasmón Superficial.

**Presentado por:**

Jhon Carlos Yanten Bombo

**Director:**

Dr. Carlos Augusto Galindez Jamioy

Departamento de Física  
Facultad de Ciencias Naturales y Exactas  
Universidad del Valle  
Cali - Colombia  
2020

# Índice

|                                                                                                                                                    | Pág.      |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1 Agradecimientos</b>                                                                                                                           | <b>3</b>  |
| <b>2 Resumen</b>                                                                                                                                   | <b>4</b>  |
| <b>3 Introducción</b>                                                                                                                              | <b>5</b>  |
| <b>4 Antecedentes</b>                                                                                                                              | <b>6</b>  |
| <b>5 Marco Conceptual</b>                                                                                                                          | <b>8</b>  |
| 5.1 Propagación de un haz de luz en un medio continuo . . . . .                                                                                    | 8         |
| 5.2 Propagación de ondas electromagnéticas en metales . . . . .                                                                                    | 10        |
| 5.3 Permitividad dieléctrica de un gas de electrones libres . . . . .                                                                              | 12        |
| 5.4 Resonancia de plasmón superficial o SPR . . . . .                                                                                              | 14        |
| 5.4.1 Relación de dispersión para los plasmones . . . . .                                                                                          | 18        |
| 5.4.2 Longitud de penetración y longitud de propagación para los plasmones . . . . .                                                               | 20        |
| 5.5 Método de la matriz de transferencia . . . . .                                                                                                 | 21        |
| <b>6 Objetivos</b>                                                                                                                                 | <b>25</b> |
| 6.1 Objetivo General . . . . .                                                                                                                     | 25        |
| 6.2 Objetivos Específicos . . . . .                                                                                                                | 25        |
| <b>7 Resultados y discusión</b>                                                                                                                    | <b>26</b> |
| 7.1 Estudio de la reflectancia en función del ángulo de incidencia de la luz sobre el sensor a 633 <i>nm</i> de longitud de onda . . . . .         | 29        |
| 7.2 Dependencia de la formación de los SPR en función del espesor de la capa metálica del oro . . . . .                                            | 31        |
| 7.3 Dependencia de la formación de los SPR con la longitud de onda de la luz incidente sobre la película metálica de oro . . . . .                 | 32        |
| 7.4 Dependencia de la formación de los SPR con el índice de refracción de la capa 1 del sensor . . . . .                                           | 33        |
| 7.5 Estudio de la formación de los SPR con el ángulo de incidencia de la luz sobre la película metálica de oro . . . . .                           | 34        |
| 7.6 Dependencia de la formación de los SPR en función del ángulo de incidencia y la longitud de onda sobre la película metálica . . . . .          | 36        |
| 7.7 Estudio de la reflectancia en función de la longitud de onda, con la variación del índice de refracción de la última capa del sensor . . . . . | 39        |
| 7.8 Inclusión de la capa de nanopartículas de oro al sensor . . . . .                                                                              | 41        |
| <b>8 Conclusiones</b>                                                                                                                              | <b>44</b> |
| <b>9 Prospectivas</b>                                                                                                                              | <b>45</b> |
| <b>10 Anexos</b>                                                                                                                                   | <b>45</b> |
| 10.1 Ecuaciones de Hemholtz . . . . .                                                                                                              | 45        |
| 10.2 Deducción de la relación de dispersión para los plasmones . . . . .                                                                           | 47        |
| 10.3 Cálculo del índice de refracción para los metales . . . . .                                                                                   | 50        |
| 10.4 Ángulos de incidencia en la película metálica . . . . .                                                                                       | 51        |
| 10.5 Dependencia de la formación de los SPR en función del espesor de la capa metálica del oro. . . . .                                            | 52        |
| 10.6 Reflectancia en función de la longitud de onda con IR variable del último medio. . . . .                                                      | 53        |
| 10.7 Inclusión de las nanopartículas de oro al sensor . . . . .                                                                                    | 54        |
| 10.8 Unidad de energía en electron-Volts . . . . .                                                                                                 | 55        |

# 1. Agradecimientos

Un sincero agradecimiento a la Universidad del Valle por permitirme ser parte de su comunidad educativa, proporcionarme las herramientas y soporte necesarios para el desarrollo normal de mis actividades académicas como estudiante de posgrado y llevar a cabo la culminación de este trabajo de investigación.

Gracias todos los profesores e integrantes del grupo de Óptica Cuántica, a la profesora Angélica Alejandra Pérez Losada, a su esposo, el profesor Mario Fernando Quiñonez Penagos, quienes contribuyeron con sus discusiones y conocimientos para enriquecer el progreso del presente trabajo.

Un agradecimiento especial a la profesor Dr. Carlos Augusto Galindez Jamioy del Dpto. de Física de la Facultad de Ciencias Naturales y Exactas de la Universidad del Valle, quien dirigió esta investigación y con sus conocimientos condujo a la terminación exitosa del presente trabajo. Finalmente, gracias a mi familia y amigos; su apoyo incondicional me alentó y motivó constantemente para alcanzar este nuevo logro.

## 2. Resumen

Los sensores de fibra óptica (OFS de sus siglas en ingles "*Optics Fiber Sensor*") han adquirido una importancia relevante en biotecnología, ciencias ambientales y otras áreas. Estos actualmente representan una forma de bajo costo para implementar diferentes dispositivos tecnológicos de detección; hay muchas configuraciones para producir OFS; su construcción puede variar desde el uso de técnicas químicas, hasta variaciones geométricas para su construcción, por ejemplo, producir OFS sin revestimiento, de geometría cónica o en forma de U, entre otras. En particular, el OFS en forma de U tiene una eficiencia significativa sobre las otras configuraciones. En este sentido, este trabajo se llevó a cabo un estudio preliminar de un sensor de fibra óptica doblado en forma de U y el cual basa su funcionamiento en la Resonancia de Plasmón Superficial (ver figura 12). En primera instancia, se buscó caracterizar las longitudes de onda de operación para dicha configuración, determinar las características más relevantes en la fabricación y operación del sensor, así como modelar el comportamiento óptico del sensor, para su futuro diseño y construcción. Se determinó que diferentes parámetros ópticos y geométricos influyen en el funcionamiento del sensor, como lo son: el espesor de la película metálica, donde el rango óptimo para la formación de los plasmones se presenta entre (50 nm) a (60 nm), también se encontró que, el ángulo de incidencia de la luz contribuye en la generación de los plasmones, como lo predice la relación de dispersión para la formación de los mismos; en la misma línea de pensamiento, la longitud de onda de la luz utilizada para estimular la formación de los plasmones, es de una gran importancia, donde estas longitudes de onda dependen del índice de refracción de las capas con las que se ha construido el sensor. Finalmente, se determina que la adición de las nanopartículas de oro al sensor, ayuda en la generación de los plasmones superficiales y en última instancia, en el proceso de sensado, ya que en las simulaciones realizadas, se observó un corrimiento en la longitud de onda en la creación del plasmón, en función del tamaño de las mismas. Por lo tanto, la resonancia de plasmón superficial, es un fenómeno muy importante desde el punto de vista teórico, experimental y práctico, por ejemplo, cuando se implementa este fenómeno con un sistema de sensado donde se utiliza una fibra óptica, que permite desde la medición de cantidades físicas (Temperatura, índice de refracción entre otros), hasta el monitoreo de agentes químicos en medios acuosos.

**Palabras Clave:** *Sensor Óptico, Resonancia de Plasmón Superficial, Transductor Óptico, Longitudes de Onda.*

### 3. Introducción

El monitoreo de metales pesados en las fuentes de agua potable en Colombia está incrementando debido a la contaminación constante de metales pesados, en su mayoría por causas antropogénicas, las cuales, no solo afectan a la salud humana sino también la fauna y la flora regional. En particular, la minería ilegal es un problema no menor, que afecta las fuentes de agua con contaminación directa e indirecta de metil-mercurio, elemento residuo que es empleado para la extracción de oro. De acuerdo con lo anterior, es imperativo implementar dispositivos a bajo costo, capaces de medir con precisión la cantidad de contaminantes diluidos en un cuerpo de agua. Por lo tanto, la presente investigación está dirigida a contribuir en el estudio de una técnica que sea fácil de implementar en condiciones de campo. En esta dirección los SPR, permiten la construcción de dispositivos tales como amplificadores de señales o transductores para sensado óptico [1, 1–10], en consecuencia, emergen los sensores de fibra óptica ó OFS<sup>1</sup> basados en el fenómeno de SPR [11, 12]. Existen muchas configuraciones para producir OFS las cuales van desde deposición química de películas metálicas hasta variaciones geométricas, tales como: fibra óptica sin revestimientos, configuración tipo D (D-shape OFS), configuración tipo cono, sensores de terminal de fibra óptica (Tip OFS) y configuración en forma de U (U-shape OFS) [12]. En este último caso en particular los U-shape OFS tienen mayor sensibilidad sobre las otras configuraciones [3], sobre todo el fenómeno de SPR se mejorará por el doblado en forma de U, puesto que permite un mejor acoplamiento entre el vector de onda de la luz incidente, con el vector de onda para los SPR formados [13, 14]. Este trabajo desarrolla un estudio numérico, el cual proporciona una herramienta para determinar parámetros ópticos, físicos y geométricos en el diseño y fabricación de sensores de fibra óptica, en especial la región de sensado para un sensor de fibra óptica en forma de U, con un pulimento lateral (ver figura 12) [10–12]. Todo el trabajo de investigación se enmarcó dentro de un proyecto financiado por la RAEng<sup>2</sup>, titulado “*Evaluation of heavy metals in freshwater to prevent and alert human consumption*” con el código CI: 71174.

El objetivo principal de la presente investigación en primera instancia se caracterizó en, determinar numéricamente las longitudes de onda características de operación del transductor de plasmones ópticos ó OPT<sup>3</sup>. Por lo anterior se realizará una revisión conceptual de la teoría detrás del fenómeno de la resonancia de plasmón superficial ó SPR<sup>4</sup>, y una revisión de trabajos previos relacionados con el trabajo de investigación, donde se discutirá los resultados del proceso de modelamiento del sensor y se destacará la caracterización de las longitudes de operación del sensor y los parámetros de operación más importantes del sensor; finalmente se obtendrán las conclusiones más relevantes del trabajo y se dará una perspectiva hacia futuras direcciones de investigación relacionadas con el tema en cuestión.

El desarrollo del trabajo de investigación fue planteado de la siguiente forma: En primer lugar se estudió la formación de los plasmones a una longitud de onda de 633 nm, ya que en trabajos previos se encuentra experimental y teóricamente que a esta longitud de onda se debe presentar formación de los SPR para distintos ángulos de incidencia [15] lo anterior se realiza con la finalidad de reproducir las curvas de reflectancia en función del ángulo de incidencia, y verificar en las curvas obtenidas la formación del plasmón, tal como lo verifica la teoría [5, 16, 17] y los datos experimentales [2, 15, 18–20]. En segundo lugar, se estudió la influencia del espesor de la segunda capa del sensor (película de oro) sobre la aparición de los SPR (ver figura 12), ya que este parámetro tiene influencia en la intensidad de formación de los SPR [13, 14]. En tercer lugar, se estudió el espectro de longitudes de onda bajo las cuales se observa la formación de los SPR con la configuración propuesta para el sensor. En cuarto lugar, se estudió la influencia del comportamiento de los SPR en función del índice de refracción del primer medio (fibra óptica) de esta forma se logra caracterizar el efecto de este medio en la observación de los plasmones. En quinto lugar, se estudió la influencia en la formación de los SPR, en función de los ángulos de incidencia de la luz sobre la película metálica de oro. En sexto lugar, se estudió la dependencia del ángulo de incidencia y la longitud de onda en la película metálica del sensor, para determinar las condiciones más favorables para una mayor formación de SPR. En séptimo lugar, se estudió el cambio del índice de refracción de la última capa<sup>5</sup>, para determinar la formación de los SPR. Finalmente, se estudió el efecto de las nano-partículas de oro sobre la película, al realizar un estudio de la reflectancia en función de la longitud de onda de la luz incidente sobre la película metálica, con la intención de observar la respuesta del sensor en función del espesor de ésta, y así la respuesta del mismo a la variación del índice de refracción de este medio.

---

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés: "Optical Fiber Sensor"

<sup>2</sup>RAEng: La Royal Academy of Engineering es la academia nacional de ingeniería del Reino Unido, fundada en junio de 1976.

<sup>3</sup>Por sus siglas en inglés: "Optical Plasmón Transducer"

<sup>4</sup>Por sus siglas en inglés: "Surfaces Plasmon Resonance"

<sup>5</sup>Como puede ser el aire o un medio acuoso

## 4. Antecedentes

Un trabajo relacionado con la construcción de un sensor basado en la resonancia de plasmón superficial en fibras ópticas se titula (Low cost plastic optical fiber sensor based on surface plasmon resonance) [21], realizado en el año 2010. En este trabajo proponen el desarrollo y construcción de un sensor de bajo costo, basado en la resonancia de plasmón superficial, para ello utilizan una fibra óptica como medio de propagación de la luz, en lugar de un prisma, como es habitual en otro tipo de configuraciones [19, 22]; en el proceso de estudio solucionan diferentes problemas en cuanto al diseño y mejoramiento de la señal de respuesta del sensor. Para la construcción del sensor utilizaron una fibra multimodo doblada en forma de U, a la cual se le realizó un pulimento en dos regiones distintas del recubrimiento de la misma, con el objetivo de exponer el núcleo de la fibra óptica, y de esta manera poder depositar una película de oro de 20 nm sobre dicha región. Al final, se concluye que la curvatura escogida para doblar la fibra permite obtener una mayor sensibilidad del sensor. Por otro lado, se encuentra que la fibra soporta múltiples modos de propagación de la luz dentro ella, y como la resonancia del plasmón superficial depende del ángulo de incidencia de la luz con una longitud de onda específica, entonces, este sistema puede soportar la formación de múltiples plasmones en el sensor. También se muestra, que la forma donde se realiza la deposición de la película es importante, ya que tiene como efecto, el cambio de la intensidad de la señal del sensor, y en el desplazamiento de las longitudes de onda donde se generan los plasmones; además, un sensor construido con una fibra óptica, permite una mayor flexibilidad de construcción, dimensiones reducidas del sistema, fácil mantenimiento y la capacidad de utilizar el sensor de forma remota.

En otra investigación, se estudia la dependencia de la formación de los SPR en función del espesor de la película metálica y el tipo de metal asociado a la construcción de un sensor en la configuración de Kretschmann, este trabajo titulado (Spectral and Angular Responses of Surface Plasmon Resonance Based on the Kretschmann Prism Configuration) fue realizado en el año 2010 [15]. El objetivo principal fue determinar las características ópticas y la respuesta espectral y angular de un sensor, basado en la resonancia de plasmón superficial en la configuración de Kretschmann, la investigación se complementa con un análisis numérico de la reflectancia, la respuesta angular y el cambio de fase usando el método de la matriz de transferencia. Para el proceso de construcción de la estructura multicapa del sensor, depositaron una capa de 5 nm de cromo sobre la superficie de un vidrio de Pyrex 7740, con el objetivo de mejorar la adhesión de la película metálica de oro al sensor. Se depositaron diferentes espesores de la película metálica, donde la fuente de luz utilizada para la excitación de los plasmones fue un láser de He-Ne cuya longitud de onda es de 633 nm. De los resultados tanto experimentales como del análisis teórico realizado a la respuesta espectral del sensor, se encuentra, que la sensibilidad del sensor está ligada con el espesor de la película metálica de oro, y debe ser alrededor de los 50 nm.

Un trabajo relacionado con la sensibilidad del índice de refracción de un sensor de fibra óptica pulido lateralmente, y basado en la resonancia de plasmón superficial, fue realizado en el 2020 y se tituló (High sensitivity refractive index sensor in long-range surface plasmon resonance based on side polished optical fiber) [10]; de la investigación se demuestra, que el uso de una fibra óptica pulida lateralmente, a la cual se le realiza una deposición de una capa metálica, en este caso plata (Ag), y donde se deposita por ambas superficies del metal, un material dieléctrico, en este caso, fluoruro de magnesio ( $MgF_2$ ), permite obtener, una mayor sensibilidad ante un cambio en el índice de refracción de los medios de construcción involucrados en el sensor, en conjunto, se logra una sensibilidad de 2812,5 nm/RIU, ante una variación de 0,01 en el índice de refracción.

Para la construcción del sensor se utilizó, una fibra óptica mono-modo, pulida cilíndricamente, lo anterior, con el objetivo de proporcionar una mayor región de sensado, donde posteriormente se realizó la deposición de las capas de la región del sensor, en este caso, tanto la capa del material dieléctrico ( $MgF_2$ ) cuyo espesor fue de 50 nm, como la capa de la película metálica (Ag) con un espesor de 40 nm; estas fueron depositadas utilizando una técnica de deposición, en la cual, un haz de electrones que incide en la muestra, permite evaporar las sustancias. Una vez realizado el pulimento y la deposición de las capas de la región de sensado, se investigó la señal óptica de salida del sensor, la cual estuvo entre 400 nm a los 1000 nm, para ello se utilizó un espectrómetro, el cual midió, la variación de la reflectancia en función de la longitud de onda; para la excitación de los plasmones se utilizó una fuente de luz blanca, donde la variación del índice de refracción de la muestra a sensar, se presentó entre (1,33 – 1,34). Este trabajo se relaciona con la presente investigación, en primera instancia, ya que, en el estudio realizado, la forma del pulimento de la fibra óptica, influye en la sensibilidad del sensor y donde, el espesor y la naturaleza de las capas que componen la región de sensado, permite estimular una mayor formación de plasmones, y por ende obtener una mayor sensibilidad.

Una investigación titulada (Dielectric Function for Gold in Plasmonics Applications: Size Dependence of Plasmon Resonance Frequencies and Damping Rates for Nanospheres) realizada en el 2015 [23], estudió el comportamiento de la función dieléctrica del oro para frecuencias por encima de  $1,8 \text{ MeV}$ . A su vez, realizaron la caracterización espectral de nanopartículas de oro, encontrando teóricamente la dependencia del tamaño de las mismas con las frecuencias de resonancia y los razones de amortiguamiento de los LSPR (Localized Surface Plasmon Resonance), donde se tuvo en cuenta los efectos de retardo, y el medio dieléctrico en el que se encuentran embebidas.

En este estudio se realiza una mejora de la función dieléctrica  $\epsilon(\omega, K)$  para el oro, con un conjunto reducido de parámetros, en general, la función dieléctrica o permitividad dieléctrica  $\epsilon(\omega, K)$  tiene una dependencia con la frecuencia, y la dirección de propagación de la luz, pero en muchos problemas esta función tiene una dependencia fuerte con la frecuencia de la luz incidente, con base en este estudio, se propone una mejora en el modelo de Drude-Lorentz que describe esta función, tal que, permite describir los datos experimentales de la permitividad dieléctrica hasta los  $3,0 \text{ eV}$ , para ello, se tuvo en cuenta las transiciones electrónicas del oro entre sus bandas de energía, lo cual, no es considerado en el modelo clásico de la función dieléctrica, es importante mencionar, que este rango cubre la respuesta plasmónica de las nanopartículas de oro con radios que van desde  $0,0 \text{ nm}$  a  $1000,0 \text{ nm}$ . Después se adapta el modelo, al considerar las nanopartículas de oro, donde se tienen en cuenta, el tamaño de las mismas. También del estudio, se encuentra las frecuencias de resonancia, obtenidas a partir de una aproximación a la respuesta dieléctrica de las nanopartículas. Los resultados obtenidos, son comparados con las mediciones espectrales de nanopartículas de oro, inmersas en una solución coloidal. Este estudio es importante para el presente trabajo de investigación, ya que, para determinar las longitudes de onda bajo las cuales se forman los plasmones, se debe tener una idea clara de la función dieléctrica del oro para diferentes frecuencias, inicialmente en este trabajo, se realiza una aproximación teórica de esta función con base en la permitividad dieléctrica modificada, y posteriormente se compara con los datos experimentales reportados para el oro. También se utilizó la función dieléctrica para las nanopartículas de oro, con el objetivo de estudiar por medio de las simulaciones, la dependencia del radio de las nanopartículas de oro en la formación de los plasmones, cuando al sensor se le incluye esta capa de nanopartículas.

## 5. Marco Conceptual

Los fenómenos de interacción de la luz con la materia son relevantes para el entendimiento de diferentes dispositivos ópticos, los cuales basan su utilidad en este tipo de interacción para funcionar, como por ejemplo: una foto-resistencia, un foto-transistor, un foto-diodo, etc [24]. Se puede entender el principio de funcionamiento de estos dispositivos, en términos de la teoría de la mecánica cuántica, pero algunos fenómenos tienen un carácter colectivo que se manifiesta a un nivel macroscópico, lo cual permite que se pueda abordar la comprensión del mismo en términos de la electrodinámica clásica; uno de estos fenómenos se presenta, cuando un haz de luz incide en una superficie metálica la cual está en contacto con un medio dieléctrico, esta puede ser absorbida a determinadas longitudes de onda debido al movimiento coordinado de los electrones cerca de la superficie de estos medios. Esta absorción de la radiación por el sistema (metal-dieléctrico), es a lo que se le conoce como la resonancia de plasmon superficial (SPR), descubierta en 1971 por Kretschmann [22] y posteriormente por Otto [19]. Inicialmente la SPR fue utilizada para construir los primeros sensores que permitían el monitoreo de moléculas en medios acuosos con el tiempo, su empleo se extendió para la medición de variables físicas como temperatura, índice de refracción, etc. [13, 14]; por lo tanto en esta sección se abordarán temáticas necesarias para el entendimiento de la resonancia de plasmón superficial, como son: la propagación de un haz de luz en un medio continuo como lo puede ser un material translúcido o un metal se describirá la permitividad dieléctrica exhibida por un gas de electrones libres, donde se abordará el fenómeno de los SPR y se estudiará finalmente un método que permite comprender la formación de plasmones superficiales en medios estratificados.

### 5.1. Propagación de un haz de luz en un medio continuo

La radiación electromagnética es un tipo de campo electromagnético, donde los campos oscilan en el espacio y el tiempo, las oscilaciones son de tal naturaleza que permiten transportar energía de un lugar a otro, de hecho, este es un fenómeno de carácter completamente ondulatorio en el cual la onda se propaga a la velocidad de la luz, este punto en específico fue demostrado por James Clerk Maxwell (1831-1879) en 1865, a partir de un conjunto de cuatro ecuaciones y determinado experimentalmente por Heinrich Hertz en 1887 al demostrar que las ondas de radio mostraban las mismas propiedades de las ondas descritas por Maxwell hoy se denomina a este conjunto de ecuaciones las ecuaciones de Maxwell (Ec. 1)<sup>6</sup> y son la base para explicar la mayoría de fenómenos electromagnéticos.

De este conjunto de ecuaciones [24–26], se puede determinar la forma que deben adoptar los campos eléctricos  $\vec{E}$  y magnéticos  $\vec{B}$  en cualquier medio donde se propagan las ondas electromagnéticas:

$$\begin{aligned} (I) \quad \nabla \cdot \vec{D} &= \rho_{ext} & (III) \quad \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ (II) \quad \nabla \cdot \vec{B} &= 0 & (IV) \quad \nabla \times \vec{H} &= \vec{J}_{ext} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (1)$$

Las anteriores ecuaciones representan la forma más general para la descripción de las ondas electromagnéticas cuando se propagan en un medio material determinado, de estas se pueden deducir las ecuaciones que aplican en el vacío. Para medios lineales e isotrópicos, el vector de desplazamiento eléctrico  $\vec{D}$  y vector de intensidad magnética  $\vec{H}$  están dados por:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad y \quad \vec{H} = \frac{1}{\mu} \vec{B}. \quad (2)$$

Los vectores  $\vec{E}$  y  $\vec{H}$  son mutuamente perpendiculares, y a su vez perpendiculares al vector  $\vec{k}$ <sup>7</sup>, que determina la dirección de propagación de la onda electromagnética estos tres vectores forman una terna para la propagación de la onda, esto significa que conociendo dos de ellos, se puede determinar el otro:

De las ecuaciones de Maxwell se puede deducir la ecuación de onda para  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$ , donde estas adoptan la forma [26], en el caso que se considere un medio lineal e isotrópico:

<sup>6</sup>Las ecuaciones de Maxwell son un conjunto de cuatro ecuaciones (originalmente 20 ecuaciones) que describen por completo los fenómenos electromagnéticos. La gran contribución de James Clerk Maxwell fue reunir en estas ecuaciones largos años de resultados experimentales, debidos a Coulomb, Gauss, Ampere, Faraday y otros, introduciendo los conceptos de campo y corriente de desplazamiento, unificando los campos eléctricos y magnéticos en un solo concepto: el campo electromagnético

<sup>7</sup>Cuando el medio es anisotrópico, las relaciones en 2 no se cumplen, ya que, en este caso la permitividad del medio es una cantidad tensorial, esto es, que depende de la dirección en que se observe.

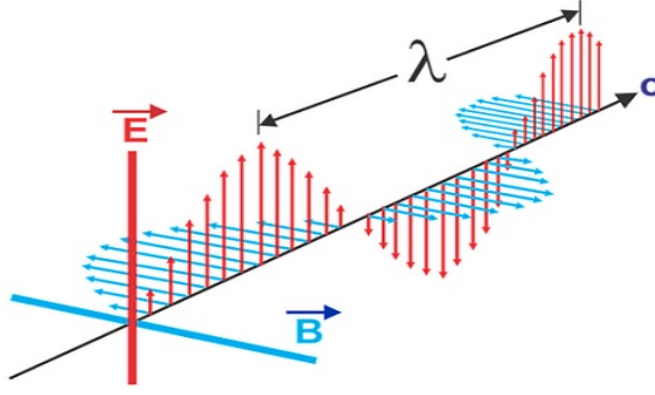


Figura 1: Diagrama esquemático de la relación geométrica entre los vectores  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$  y  $\vec{k}$ .

$$\begin{aligned}\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} &= 0, \\ \nabla^2 \vec{B} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} &= 0.\end{aligned}\tag{3}$$

De estas ecuaciones se puede deducir la rapidez de propagación de las mismas en un medio diferente al vacío en el cual se propaga la onda:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}} = \frac{c}{n} \quad ; \quad n = \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{\epsilon_0\mu_0}} \approx \sqrt{\epsilon_r},\tag{4}$$

donde  $\epsilon$  y  $\mu$  son la permitividad dieléctrica y permeabilidad magnética del medio donde se propagan.

Inicialmente la descripción del comportamiento de la radiación cuando esta interactúa con un medio transparente, fue realizada por Isacc Newton(1642-1727) en su teoría corpuscular de la luz en 1704, pero esta teoría es compatible con la teoría ondulatoria de Maxwell, ya que al generarse un haz de luz de una fuente, esta irradia ondas electromagnéticas de manera uniforme en todas las direcciones, los frentes de ondas asociados a la propagación de la radiación se pueden representar por medio de rayos perpendiculares a estos frentes de onda, además, debido a las dimensiones de la fuente comparadas con la distancia en la que se propaga la onda, estos frentes son casi planos, de modo que sus correspondientes rayos son paralelos entre si. En esta sección se abordará la descripción de la propagación de un haz de luz en términos de la teoría de rayos, ya que, esta es m'as útil cuando las dimensiones del medio donde se propaga el haz, es más grande que la longitud de onda de la radiación electromagnética; a lo largo del documento se hablará de haz de luz cuando se desee observar el camino seguido por la luz en un medio, y se mencionará una onda electromagnética, cuando se desee estudiar la interacción de los campos electromagnéticos con el medio, pero en última instancia, se debe tener presente que una onda electromagnética y un haz de luz representan el mismo fenómeno [24–26].

Cuando un haz de luz incide sobre un medio dieléctrico con un índice de refracción real, en el punto de incidencia se genera una haz reflejado, cuyo ángulo de reflexión es igual al ángulo de incidencia ( $\theta_i$ ) con respecto a la normal, también se produce un haz que se transmite en el segundo medio pero con un ángulo distinto conocido como ángulo de transmisión o refracción ( $\theta_t$ ) a este fenómeno se le denomina refracción de la luz (ver figura 2). El ángulo de transmisión o refracción ésta determinado por la ley de Snell(5)<sup>8</sup>:

$$n_1 * \text{sen}(\theta_i) = n_2 * \text{sen}(\theta_t).\tag{5}$$

Se puede ver un fenómeno asociado con la ley de Snell, el cual se denomina reflexión total interna y sucede, justo cuando el haz se propaga de un medio con un índice de refracción más grande a uno más pequeño, como puede ser

<sup>8</sup>La ley de Snell-Descartes es una relación utilizada para calcular el ángulo de refracción de la luz al atravesar la superficie que separa dos medios dieléctricos con índice de refracción distinto. El nombre proviene de su descubridor, el matemático holandés Willebrord Snell van Royen (1580-1626).

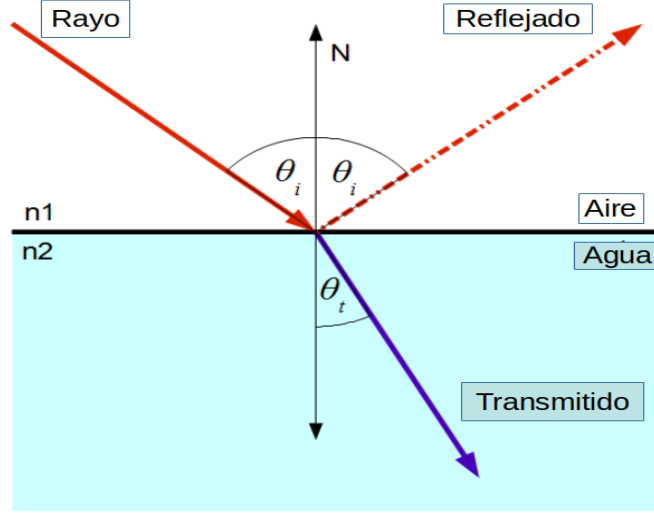


Figura 2: Propagación de un haz monocromático en dos medios continuos tales como el aire y agua

el caso en que el haz viaje del agua al aire en esta situación existirá un ángulo de incidencia conocido como ángulo crítico ( $\theta_c$ ), tal que el ángulo de transmisión ( $\theta_t$ ) tome un valor de 90 lo anterior tiene como consecuencia que la transmitancia en el medio final sea cero, este ángulo está dado por:

$$\text{sen}(\theta_c) = \frac{n_2}{n_1}. \quad (6)$$

Una forma de representar matemáticamente una onda plana monocromática, es por medio del campo eléctrico:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 * e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (7)$$

donde  $\vec{k}$  es el vector de onda, de la onda electromagnética, para la geometría mostrada en la figura(2):

$$\vec{k} \cdot \vec{r} = k_x x + k_y y. \quad (8)$$

Se puede expresar la magnitud de este vector en términos de índice de refracción de la siguiente manera:

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{\omega}{c} n, \quad (9)$$

donde  $n$  el índice de refracción del medio, el cual puede ser una cantidad compleja, donde el medio en cuestión no solamente permite la propagación de la onda, si no que además, absorbe parte de la energía que transporta; la velocidad de la luz dentro del medio de propagación está determinada por la parte real del índice de refracción del medio, donde  $n$  está determinado por 4.

## 5.2. Propagación de ondas electromagnéticas en metales

Cuando una onda se propaga por un medio conductor se generan dos fenómenos denominados absorción y dispersión el primero se origina cuando la energía que transporta la onda se atenúa al penetrar el conductor, el segundo fenómeno tiene como consecuencia que a diferentes frecuencias la onda se propague a distintas velocidades este comportamiento también se presenta en medios transparentes como por ejemplo el vidrio [24–26].

Supongamos que existe una densidad de carga libre  $\rho_f$  en el conductor, que tiene asociada una conductividad eléctrica ( $\sigma$ ), la densidad de corriente en el conductor estará dada por:

$$\vec{J}_f = \sigma \vec{E}. \quad (10)$$

De la ecuación de continuidad, se tendrá entonces:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_f = 0. \quad (11)$$

De lo cual se deduce que la densidad de carga será:

$$\rho_f(t) = \rho_f(0) e^{-\frac{\sigma}{\epsilon} t}. \quad (12)$$

Se puede observar que aparece un tiempo característico  $\tau$ , que determina el tiempo en el cual la densidad de carga libre presente en el conductor decae en un factor de  $1/e$ , este tiempo está determinado por:

$$\tau = \frac{\epsilon}{\sigma}. \quad (13)$$

La ecuación de onda en términos del campo eléctrico<sup>9</sup> adopta la forma:

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \mu\sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (14)$$

La descripción de los campos eléctrico y magnético, obtenidos a partir de las anteriores ecuaciones, cuando se considera que una onda incide perpendicular a la superficie del metal estarán dadas por:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-\kappa z} e^{i(\vec{k}z - \omega t)} \quad y \quad \vec{B} = \vec{B}_0 e^{-\kappa z} e^{i(\vec{k}z - \omega t + \phi)}, \quad (15)$$

de la ecuación de onda obtenida, se puede llegar a:

$$\tilde{k}^2 = \mu\epsilon\omega^2 + i\mu\sigma\omega. \quad (16)$$

El vector de onda adquiere la forma:

$$\tilde{k} = k + i\kappa. \quad (17)$$

La parte real e imaginaria del vector de onda estarán dadas respectivamente por:

$$\begin{aligned} k &= \omega \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{2}} \left[ \sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\epsilon\omega}\right)^2} + 1 \right]^{1/2}, \\ \kappa &= \omega \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{2}} \left[ \sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\epsilon\omega}\right)^2} - 1 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (18)$$

Se puede apreciar que aparece una constante ( $\kappa$ ) que se denomina coeficiente de atenuación, donde la intensidad de la onda se atenúa  $1/e$  cuando se ha propagado una distancia "d" dada por la relación 19, a éste fenómeno se le denomina absorción, y aparece cuando la onda se propaga por el metal; el inverso de la constante de atenuación, se denomina "longitud de penetración" de la onda electromagnética en el medio conductor:

$$d \equiv \frac{1}{\kappa}. \quad (19)$$

Las propiedades ópticas y eléctricas de un conductor se pueden determinar al estudiar cómo la luz incide y se refleja sobre el mismo. Existe un modelo muy simple de conducción de los metales, denominado el modelo de Drude o Lorentz-Drude [26], en el cual, no se tiene en cuenta la interacción entre los electrones de conducción del metal, y tampoco la forma del potencial electrónico formado por la red cristalina de los átomos del metal, en este modelo, se determina que la permitividad dieléctrica de un metal varía como:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \right), \quad (20)$$

donde  $\omega_p$  se denomina la frecuencia de plasma del metal,  $m$  es la masa de los electrones, y  $\gamma$  es la frecuencia de colisiones de los electrones con los átomos de la red que conforman el metal.

La parte imaginaria de la permitividad dieléctrica es la responsable de las características de conducción del metal. La relación (20) es válida cuando la longitud onda de la radiación incidente es más grande que la constante

---

<sup>9</sup>La ecuación de onda para el campo magnético es idéntica

de red, que básicamente significa que los campos electromagnéticos son aproximadamente uniformes dentro del metal y por lo tanto se puede afirmar  $\epsilon(\vec{K}, \omega) \approx \epsilon(\omega)$ , pero cuando no se da este caso, la función dieléctrica del metal tendrá una dependencia con el vector de onda. De la ecuación (20) se puede inferir entonces:

$$\begin{aligned}\epsilon(\omega) &= \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega), \\ \sigma(\omega) &= \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega), \\ \tilde{n}(\omega) &= n_1(\omega) + in_2(\omega) = \sqrt{\epsilon}.\end{aligned}\tag{21}$$

A partir de la ecuación(21) para  $\epsilon(\omega)$ , se puede verificar el fenómeno de dispersión temporal, en el cual a distintas frecuencias la onda se propagará a diferentes velocidades, también se verifica que la onda será atenuada a medida que se propaga por el metal, fenómeno denominado absorción, ambos fenómenos aparecen descritos también por la ecuación(18). En la siguiente sección se discutirá el modelo de Lorentz-Drude, y se deducirá la relación (20), la cual es esencial para entender el fenómeno de resonancia de plasmón superficial.

### 5.3. Permitividad dieléctrica de un gas de electrones libres

El modelo de plasma de un gas de electrones libres, que fue inicialmente desarrollado hacia 1900 por Paul Drude y conocido modelo de Lorentz-Drude [13, 14, 25, 26], representa una base para explicar el proceso de conducción en los metales, en este modelo no se tiene en cuenta ni el potencial exhibido por la red de átomos del metal y tampoco la interacción eléctrica entre electrones, solo se tiene en cuenta el proceso dispersivo de los electrones con los núcleos del metal. En este modelo se supone que los electrones del metal forman un gas, donde la interacción entre estos es despreciable; si se aplica un campo eléctrico  $\vec{E}$  a este sistema, estos electrones se moverán en dirección contraria a este campo  $\vec{E}$ , si este campo es como el que transporta una onda electromagnética(Ec. 7), los electrones oscilarán en respuesta a este campo y el correspondiente movimiento estará amortiguado, debido a las colisiones de los mismos con los núcleos de los átomos de la red. Se define entonces una frecuencia característica de colisión  $\gamma_{bulk} = 1/\tau$ , donde  $\tau$ , representa el tiempo en el que se dan estas colisiones o llamado tiempo de relajación, este tiempo típico es del orden de los  $10^{-14}s$  a temperatura ambiente, que corresponde a una frecuencia de  $\gamma_{bulk} = 100THz$ .

Con base en lo anterior, la respuesta de los electrones del metal estará determinada por la siguiente ecuación:

$$m * \frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma \frac{dx}{dt} = -eE,\tag{22}$$

donde  $x$  representa la dirección de movimiento de los electrones en la cual se proyecta el campo eléctrico. Asumiendo una dependencia armónica del campo eléctrico en función del tiempo:

$$E(t) = E_0 e^{(-i\omega t)}.\tag{23}$$

Teniendo en cuenta que los electrones responda armónicamente a este campo eléctrico, se tendrá entonces:

$$x(t) = x_0 e^{(-i\omega t)},\tag{24}$$

donde  $x_0$  representa la amplitud máxima de oscilación de los electrones dentro del material. Utilizando las anteriores relaciones, podemos obtener entonces que:

$$x(t) = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} E(t).\tag{25}$$

Debido al desplazamiento dentro del metal por parte de los electrones, tiene como consecuencia que aparezca una polarización del mismo por el desplazamiento de esta carga, con lo cual la polarización  $P$  estará dada por:

$$P = -nex,\tag{26}$$

donde  $n$  representa la densidad de portadores de carga del material, cuyo valor único para cada metal. Claramente,  $P$  tendría el siguiente valor:

$$P = -\frac{ne^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} E,\tag{27}$$

y el vector de desplazamiento eléctrico  $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$ , tomaría la siguiente forma:

$$D = -\epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)}\right) E. \quad (28)$$

En la anterior ecuación  $\omega_p$  se denomina la frecuencia de plasma del metal cuyo valor es:

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon * m}. \quad (29)$$

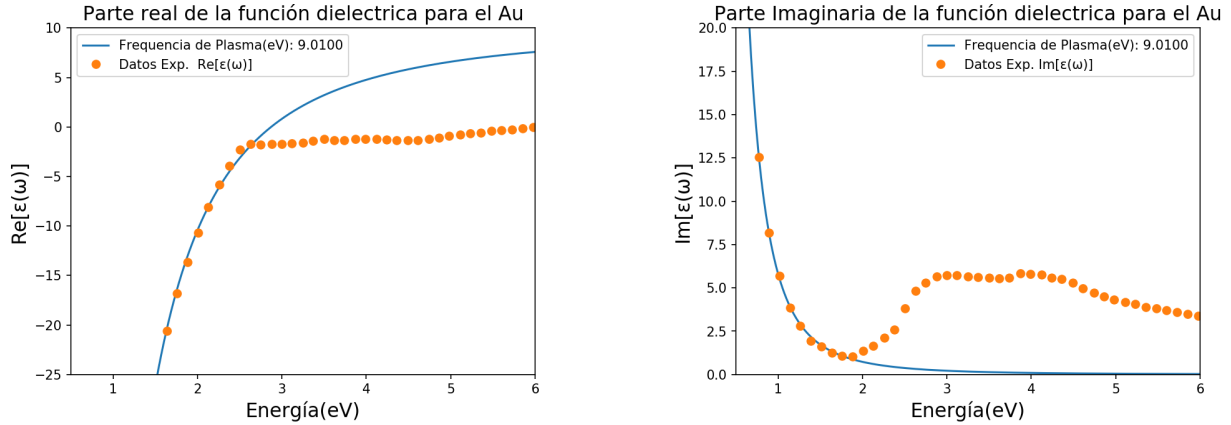
Como se puede observar, esta frecuencia es única para cada metal en virtud del parámetro  $n$ , donde para el oro este valor es aproximadamente  $8,54 \text{ eV}$  ([13,14]). Se puede entonces inferir que la respuesta dieléctrica del material estaría dada por:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)}\right) \quad (30)$$

La parte real e imaginaria de esta función estarían dadas por:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 * \tau^2}{(1 + \omega^2 * \tau^2)} \quad (31)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\omega_p^2 * \tau}{\omega(1 + \omega^2 * \tau^2)} \quad (32)$$



(a) Parte real de la función dieléctrica del oro para frecuencias entre  $0,4 \text{ eV}$  a  $4,2 \text{ eV}$ .

(b) Parte imaginaria de la función dieléctrica del oro para frecuencias entre  $0,4 \text{ eV}$  a  $4,2 \text{ eV}$ .

Figura 3: En las gráficas (3a) y (3b), se observa la función dieléctrica para el oro en el modelo de Lorentz-Drude (línea sólida) y los datos experimentales (puntos verdes) reportados en la literatura [27].

En la figura(3) se muestra la función dieléctrica del oro, tanto la parte real como imaginaria (Ec. 31), donde aparecen los datos experimentales reportados para el mismo [27]. Se puede observar a energías menores que  $2,5 \text{ eV}$ , el modelo de Lorentz-Drude explica adecuadamente los datos experimentales de la función dieléctrica del oro, pero a energías mayores a los  $2,5 \text{ eV}$ , el comportamiento de la función dieléctrica (Ec. 30) difiere de los datos experimentales, lo anterior se presenta como consecuencia de las transiciones electrónicas de los electrones en las bandas de energía del sólido; en la deducción de la relación (30) no se tiene en cuenta este tipo de transiciones, por lo tanto, un modelo que tenga en cuenta el proceso de interacción de los electrones, y además la forma que toma el potencial eléctrico que forman los átomos del metal, permitirá una mejor descripción de la función dieléctrica de este metal.

Cuando la frecuencia de la luz que se propaga por el metal, es menor que el inverso del tiempo de relajación  $\omega \ll 1/\tau$ , el término  $\epsilon_2(\omega) \gg \epsilon_1(\omega)$  y, por lo tanto, el metal tendrá un comportamiento más eléctrico que óptico<sup>10</sup>,

<sup>10</sup>El término eléctrico se refiere la capacidad del material de tener una conductividad eléctrica determinada, y el término óptico, en el caso en que la absorción de la radiación por parte del material sea despreciable

en el caso contrario, cuando  $\omega \gg 1/\tau$  comparable a la frecuencia de plasma, entonces  $\epsilon_2(\omega) \approx 0$  y la permitividad dieléctrica del metal adquirirá un comportamiento completamente óptico.

Las relaciones (31), junto con las ecuaciones en (21) permiten relacionar las funciones dieléctricas  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  para el metal, con el índice de refracción  $n(\omega)$  y el coeficiente de extinción  $\kappa(\omega)$  de la siguiente manera (ver la sección de Anexos):

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \quad (33)$$

$$\epsilon_2 = 2n\kappa \quad (34)$$

$$n^2 = \frac{\epsilon_1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (35)$$

A partir de las relaciones en (33) se puede calcular el índice de refracción del metal, conociendo la permitividad dieléctrica del mismo. Como veremos, en la última sección relacionada con el método de matriz de transferencia, el conocimiento del  $n(\omega)$  es esencial para determinar el comportamiento de la luz, cuando esta atraviesa cada capa del sensor óptico.

#### 5.4. Resonancia de plasmón superficial o SPR

Las ondas de plasmón superficial ó SPP<sup>11</sup> son oscilaciones colectivas de electrones libres entre las interfaces de dos materiales (ver figura 4), estas oscilaciones se producen cuando la función dieléctrica asociada al comportamiento óptico del material presenta signos opuestos; la anterior condición se satisface en el caso de que se tenga un dieléctrico y metal en contacto. En los metales la función dieléctrica<sup>12</sup> toma valores negativos para un rango de longitudes de onda, pero en un dieléctrico se puede apreciar que esta cantidad es constante y real, por lo tanto, al incidir la luz desde el dieléctrico al metal, existe la posibilidad de la formación del plasmón, como veremos más adelante, debe existir una coincidencia de fase entre la onda incidente en el metal y el plasmón formado.

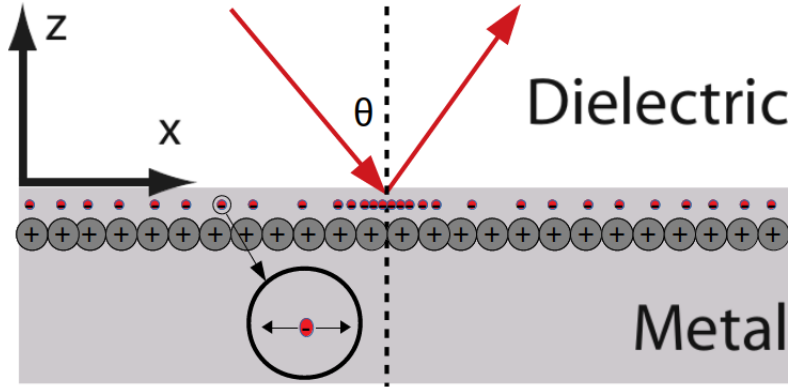


Figura 4: Representación ilustrativa de una onda electromagnética incidente con una polarización TM, la cual puede dar pie a la oscilación de los electrones en la superficie del metal lo que se conoce como plasmón, el cual será formado bajo la coincidencia de fase del vector de onda de la luz y el plasmón formado.

Una analogía asociada con el fenómeno de resonancia de plasmón superficial, es pensar en las ondas producidas en la superficie del agua. Cuando incide una gota sobre la superficie se produce un patrón de oscilaciones, donde se da la formación de un cúmulo de crestas circulares, en este caso, el agente estimulador para tal fenómeno lo representa la gota de agua. Cuando se hace incidir un haz de luz en un punto específico del metal (ver figura 4), sabemos que transporta un campo eléctrico, el cual puede generar una acumulación de carga en el punto de incidencia, debido a que los electrones de conducción no están completamente ligados al núcleo de los átomos del metal, todo esto produce un desplazamiento de carga, lo que a su vez generará una fuerza de restitución entre los átomos ionizados con los electrones y una fuerza de repulsión entre los mismos. El efecto final será la restitución de los

<sup>11</sup>Por sus siglas en inglés: "Surface Plasmon Polariton"

<sup>12</sup>Se debe tener presente que la función dieléctrica de un metal es una cantidad compleja, la cual depende de la frecuencia de la luz que se propaga por el mismo, ver sección 4.3 del marco teórico

electrones a su punto de origen, donde comenzarán a oscilar respecto a una posición de equilibrio, respondiendo así al campo eléctrico del haz incidente, teniendo en cuenta nuestra analogía inicial el haz actuará como la gota de agua.

En los metales nobles, la densidad de portadores de carga disponible para el proceso de conducción de corriente puede ser del orden de  $10^{23} \text{ cm}^{-3}$  [28], con lo cual, la oscilación de los electrones, debido a la onda electromagnética incidente puede dar lugar a una gran absorción de la luz a determinadas longitudes de onda, para dar cabida a la formación de los SPP. Como se observará posteriormente en esta sección, la onda incidente en la superficie del metal debe tener una polarización adecuada e incidir a un ángulo específico, esto es, la fase de la onda incidente debe coincidir con la fase del plasmón formado para que se estimule la formación de los SPP, se debe tener presente que solo cuando se logra la condición anterior denominada resonancia, toda la luz será absorbida y no habrá un haz reflejado y, por lo tanto, se tendrá el comportamiento esquematizado en la figura(4).

Considérese una onda electromagnética que se propaga entre dos medios planos como se muestra en la siguiente figura:



Figura 5: Ilustración de dos medios planos, donde uno es un dieléctrico con una constante dieléctrica real  $\epsilon_d$  y el otro es un metal con una constante dieléctrica  $\epsilon_m$ .

La función dieléctrica del medio en conjunto que se desea estudiar se puede representar por:

$$\epsilon(z, \omega) = \begin{cases} \epsilon_d & \text{if } z > 0, \\ \epsilon_m & \text{if } z < 0, \end{cases} \quad (36)$$

donde la función dieléctrica del metal como se mencionó es compleja, es decir que tiene una parte real y una parte imaginaria:

$$\epsilon_m(\omega) = \epsilon_{m1}(\omega) + i\epsilon_{m2}(\omega). \quad (37)$$

Para describir la interacción de una onda electromagnética con el sistema de estudio, se utilizarán las ecuaciones de Maxwell (Ec.1) aplicadas al sistema de la figura (5). Para solucionar dicho sistema de ecuaciones suponemos que la onda electromagnética (Ec.7) inicialmente se propaga por el medio dieléctrico e incide a un ángulo determinado sobre la superficie del metal. Encontramos dos tipos de soluciones del sistema de ecuaciones (EC.1): ondas con polarización transversal magnética ó TM<sup>13</sup> y ondas con polarización transversal eléctrica ó TE<sup>14</sup>, o simplemente ondas tipo p y tipo s respectivamente. En estas ondas el término TM o TE se refiere a la dirección del campo eléctrico de la onda con respecto al plano de incidencia de la onda electromagnética, como se observa en la figura (6).

Se puede demostrar<sup>15</sup> que para el campo eléctrico obtenemos la siguiente ecuación de onda<sup>16</sup>:

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (38)$$

<sup>13</sup>Por sus siglas en inglés: "Transversal Magnetic"

<sup>14</sup>Por sus siglas en inglés: "Transversal Electric"

<sup>15</sup>Ver sección de anexos

<sup>16</sup>Similarmente se obtiene para el campo magnético

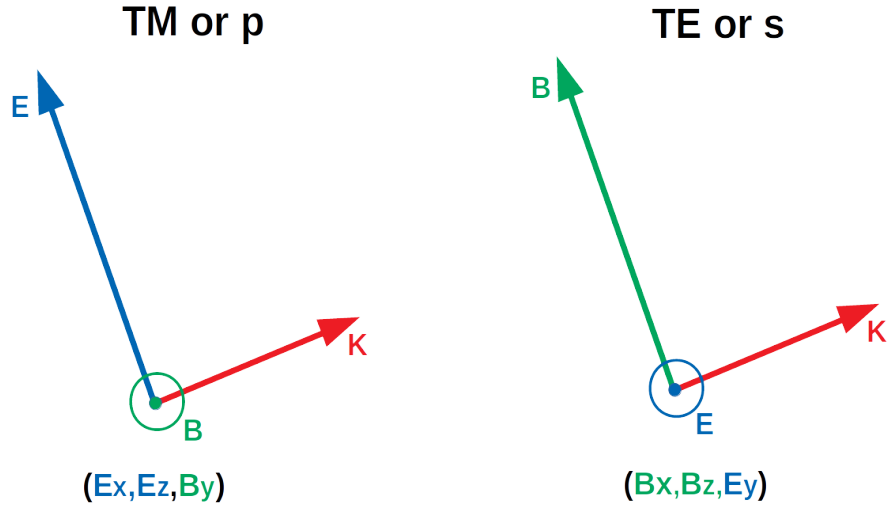


Figura 6: a) Onda TM en donde la polarización del campo eléctrico está en el plano de incidencia de la onda, b) onda TE en donde la polarización del campo eléctrico es perpendicular al plano de incidencia.

La ecuación (38) se debe resolver para ambos medios, donde las soluciones obtenidas deben cumplir con las condiciones de contorno en la frontera de los dos medios ( $z = 0$ ). El tipo de soluciones buscadas son en las cuales tenemos una dependencia armónica en el tiempo, para el campo eléctrico, esto es:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) * e^{(-i\omega t)}. \quad (39)$$

Insertando (39) en (38) se obtiene:

$$\nabla^2 \vec{E} + k_0^2 \epsilon \vec{E} = 0. \quad (40)$$

La ecuación (40) es conocida como la ecuación de Helmholtz y es fundamental a la hora de estudiar la propagación de ondas electromagnéticas en una guía de onda [24–26].

Del problema a estudiar se conoce, que las posibles soluciones deben estar confinadas en las interfaces metal - dieléctrico, y además, los únicos posibles modos de la luz para la excitación de los plasmones deben cumplir, que la polarización de las ondas sea TM o TE, teniendo en cuenta lo anterior (ver sección de anexos) se obtiene para las ondas TM y TE lo siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \vec{H}_y}{dt^2} + (k_0^2 n^2 - \beta) \vec{H}_y &= 0 \quad (TM), \\ \frac{d^2 \vec{E}_y}{dt^2} + (k_0^2 n^2 - \beta) \vec{E}_y &= 0 \quad (TE), \end{aligned} \quad (41)$$

donde  $k_0$  es el vector de onda en el vacío e igual a  $\omega/c$ , y  $\beta$  la componente  $x$  del vector de onda  $k$  de la onda resultante en la interfaz, la cual es paralela a las superficies.

De la condición de confinamiento de las soluciones en la interfaz, se obtiene lo siguiente<sup>17</sup>:

Para  $z > 0$ , (dieléctrico):

$$\begin{aligned} \vec{H}_y &= Ae^{-\sqrt{\beta^2 - k_0^2 \epsilon_s} z}, \\ \vec{E}_y &= Be^{-\sqrt{\beta^2 - k_0^2 \epsilon_s} z}. \end{aligned} \quad (42)$$

<sup>17</sup>Ver sección de anexos

Similarmente, para  $z < 0$ , (metal):

$$\begin{aligned}\vec{H}_y &= Ce^{\sqrt{\beta^2 - k_0^2 \epsilon_s} z}, \\ \vec{E}_y &= De^{\sqrt{\beta^2 - k_0^2 \epsilon_s} z}.\end{aligned}\tag{43}$$

En el caso de que consideremos ondas con polarización TE ( $E_y$ ) donde los campos deben cumplir con las condiciones de contorno:

- $E_y$  debe ser continuo en la interfaz, esto es en  $z = 0$ .
- $\partial E_y / \partial t$  debe ser continuo en la interfaz, esto es en  $z = 0$ .

De la condición inicial se obtiene:

$$B = D,\tag{44}$$

y de la segunda condición de contorno obtenemos:

$$B^2 k_0^2 (\epsilon_s - \epsilon_m) = 0.\tag{45}$$

Como  $\epsilon_m$  además de ser una cantidad compleja, la parte real toma valores negativos (oro y plata) [14], por lo tanto, sí  $A = 0$ , no debería ser posible que una onda incidente con esta polarización estimule la formación de plasmones en la interfaz. Este punto es importante, ya que la visualización del fenómeno de SPR, para el caso en que el medio dieléctrico donde se propaga la luz inicialmente sea una fibra óptica, dependerá de la intensidad de formación del plasmón con respecto las ondas incidentes que no generan o forman alguno [13, 14], como puede ser el caso en que la onda incide con una polarización TE en la interfaz, o también que el ángulo de incidencia de la onda no sea el adecuado, para satisfacer la condición de resonancia.

Para el otro caso en que consideremos ondas con polarización TM ( $H_y$ ), donde los campos deben cumplir con las condiciones de contorno, obtenemos:

- $H_y$  debe ser continuo en la interfaz, esto es en  $z = 0$ .
- $1/\epsilon * \partial E_y / \partial t$  debe ser continuo en la interfaz, esto es en  $z = 0$ .

De la condición inicial se obtiene:

$$A = C,\tag{46}$$

y de la segunda condición de contorno:

$$\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_y}{\partial t} \Big|_{dielectric} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_y}{\partial t} \Big|_{metal}\tag{47}$$

Se obtiene:

$$\frac{\beta - k_0^2 \epsilon_d}{\epsilon_d^2} = \frac{\beta - k_0^2 \epsilon_m}{\epsilon_m^2},\tag{48}$$

donde obtenemos una de las ecuaciones más importantes para la formación de los plasmones:

$$k_{sp} = \beta = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m}}.\tag{49}$$

Los ángulos bajo los cuales se formara el plasmón estará dado por:

$$\text{sen}(\theta) = \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m}}\tag{50}$$

Con  $\theta$  representando el ángulo que hace la onda incidente con respecto a la normal de la película metálica, y la cual promueve la aparición del plasmón.

La anterior ecuación (Ec.49) se conoce como la relación de dispersión para los plasmones, y muestra que una onda electromagnética incidente con una polarización TM, producirá oscilaciones de los electrones en la interfaz, entonces el vector de onda en la dirección paralela a la interfaz de los campos confinados debe tener la forma de la expresión (Ec.49), como veremos esta importante relación determina bajo que condiciones los SPP pueden ser formados.

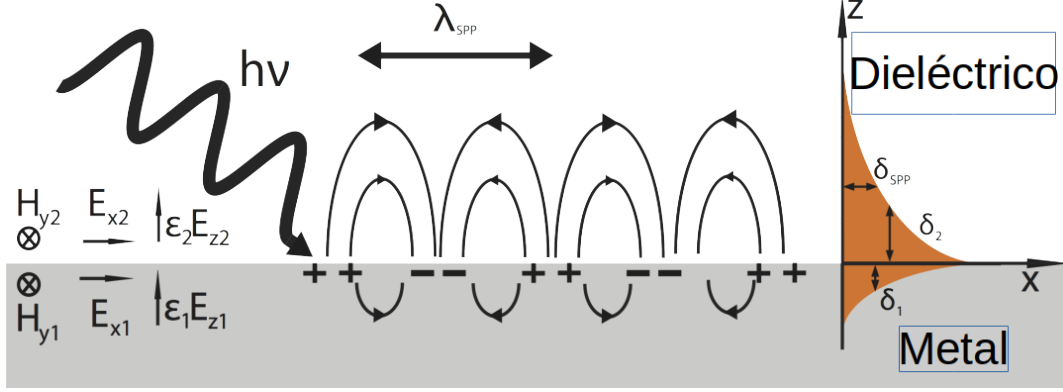


Figura 7: Representación esquemática de los campos electromagnéticos creados en la interfaz de ambos medios, cuando se ha cumplido la coincidencia de fase del vector de onda del haz incidente y el SPP formado.

Una representación esquemática del perfil de los campos cuando se ha creado el SPP se puede ver en la figura (7), donde podemos resaltar varios puntos importantes:

- Los SPP representan modos acoplados para los campos tanto en el dieléctrico como en el metal.
- El campo eléctrico decae más rápido en el metal que en el dieléctrico, debido a que la longitud de penetración de la onda evanescente asociada al plasmon es mayor en el metal que en el dieléctrico, lo anterior se debe en principio a una mayor disipación de la energía de la onda por parte del metal, debido a la movilidad de los electrones en los mismos, en la figura(7) lo anterior se representa por el número de líneas para ambos medios.
- La polarización de la onda incidente debe ser tal, que el campo eléctrico esté en el plano de incidencia, con lo cual la onda debe tener una polarización TM.
- El vector de onda de la onda incidente, debe ser tal, que la componente paralela a la superficie coincida con el vector de onda del plasmón formado, lo cual no siempre se cumple para cualquier dieléctrico en contacto con el medio metálico, en la siguiente sección se hablara de este punto.

Con el fin de entender las propiedades de los SPP, en la siguiente sección se estudiará la relación de dispersión (Ec.49).

#### 5.4.1. Relación de dispersión para los plasmones

Como observamos en la sección(4.4), la ecuación (49) representa el vector  $k_{sp}$  para la formación de una onda confinada en la interfaz, como se muestra en la figura (7), anteriormente se mencionó que este vector está asociado a los plasmones superficiales; un aspecto importante es que las oscilaciones de los electrones asociadas al plasmón, no se presentan simplemente al incidir una onda en la estructura, en realidad, como veremos existe un conjunto de frecuencias o longitudes de onda, en las cuales se puede presentar la formación del plasmón, adicionalmente a estas frecuencias la luz debe cumplir con la relación (49).

Para observar la dependencia de la longitud de onda del plasmón formado con su respectivo vector de onda, notemos primero de la relación de dispersión lo siguiente: la (Ec. 49) representa la componente horizontal a la superficie del vector de onda ( $\beta$ ) del haz que incide en el metal, esto significa, que la onda incidente en la película metálica, en una dirección específica, debe tener esta componente del vector igual al vector de onda que da pie a la formación del plasmón, de lo contrario, no se podrá excitar los SPP. Para que se cumpla lo anterior, el ángulo de

incidencia debe cumplir la relación (.50).

La relación (49) es una cantidad compleja, debido a que la función dieléctrica  $\epsilon_m(\omega)$  del metal lo es, y además depende de la frecuencia, se puede demostrar que las componentes real e imaginaria de la magnitud del vector de onda del plasmón ( $k_{sp}$ ) formado [13], estarán dadas por:

$$k_{sp} = \beta = k'_{sp-x} + ik''_{sp-x} \quad (51)$$

Donde la parte real e imaginaria de  $k_{sp}$  serán:

$$\begin{aligned} k'_{sp-x} &= \frac{\omega}{c} \left( \frac{\epsilon_{m1}\epsilon_d}{\epsilon_{m1} + \epsilon_d} \right)^{1/2} \\ k''_{sp-x} &= \frac{\omega}{c} \left( \frac{\epsilon_{m1}\epsilon_d}{\epsilon_{m1} + \epsilon_d} \right)^{1/2} \frac{\epsilon_{m2}}{2\epsilon_{m1}^2} \end{aligned} \quad (52)$$

La cantidad  $\epsilon_{m1}$  y  $\epsilon_{m2}$  en el modelo de Lorentz-Drude representan la parte real e imaginaria de la función dieléctrica del metal, ver ecuaciones(31).

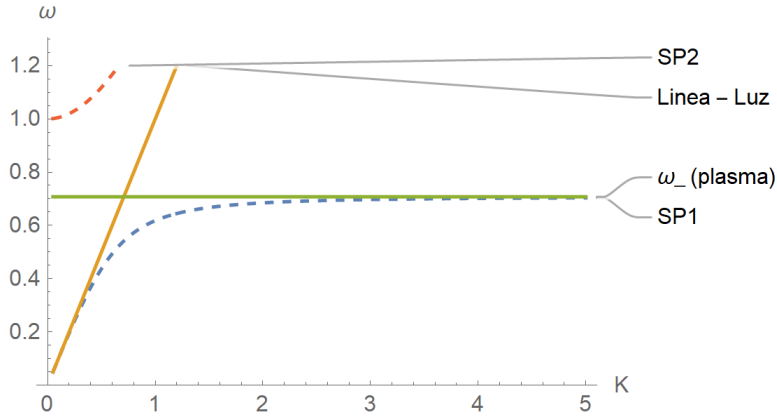


Figura 8: Relación de dispersión para la formación de los SPP en una interfaz oro-aire.

Vamos a estudiar el comportamiento de las relaciones (52) en específico de la parte real  $k'_{sp-x}$ , la cual da cuenta de las propiedades ópticas de los plasmones formados. La gráfica de esta relación se muestra en la figura (8), donde también aparece la relación de dispersión  $\omega = c * k$  para la luz; las ramas superior e inferior representan los modos acoplados cuando se ha creado el plasmón, en este caso, los modos radiactivo (rama superior) y no-radiactivo (rama inferior). Para valores pequeños del vector de onda, la curva para los SPP, presentan un comportamiento similar a la línea de luz, aunque el vector de onda es un poco mayor, debido a lo anterior, estas oscilaciones de los electrones asociadas a los plasmones creados, no pueden transformarse en luz y por esta razón se le denomina modos de oscilación no-radiactivos. A medida que el vector de onda de los SPP es mayor, el valor de la frecuencia del plasmón ( $\omega_{sp}$ ) se aproximará al valor asintótico  $\omega_{pb}/\sqrt{2}$ , donde se ha realizado la gráfica en el caso de que el medio dieléctrico sea vacío. El valor más grande de energía que se absorbe, para dar pie a la formación del plasmón (49) se da para:

$$-\epsilon_m = \epsilon_d \quad (53)$$

Si sustituimos el valor  $\epsilon_m$  en el modelo de Drude (30), y considerando que la parte imaginaria de la permitividad dieléctrica del metal, es despreciable a frecuencias cercanas a la frecuencia de plasma, obtenemos:

$$-1 + \frac{\omega_{pb}^2}{\omega_{sp}^2} \epsilon_m = \epsilon_d \quad (54)$$

Donde  $\omega_{sp}$  representa la frecuencia de plasma del metal, la cual está determinada por la relación (29).

De la ecuación 54 obtenemos que la frecuencia del plasmón ( $\omega_{sp}$ ), donde se da la máxima transferencia de energía del haz incidente, estará dado por:

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_{pb}}{\sqrt{1 + \epsilon_d}} \quad (55)$$

Si el medio dieléctrico es aire, entonces esta frecuencia será:

$$\omega_{sp} \approx \frac{\omega_{pb}}{\sqrt{2}} \quad (56)$$

Como se puede observar de la gráfica en la figura (8), esta frecuencia representa justamente el límite energético que puede alcanzar el plasmón cuando el modo acoplado del mismo es no-radiactivo. De lo anterior se desprende que el vector de onda de la luz incidente que no coinciden con el vector de onda asociado al plasmón, no podrá excitar ningún SPP y, por lo tanto, si incide directamente luz desde el vacío a una superficie metálica no habrá formación plasmón alguno, ya que el vector de onda de la línea de luz, siempre es menor que el vector de los posibles SPP creados, esta es la razón por la cual se necesitan diferentes técnicas para poder lograr esta coincidencia, y de esta manera tener formación de los SPP en diferentes configuraciones [13].

De la figura (8) se observa que los modos radiactivos del plasmón solo pueden lograrse para frecuencias iguales o superiores a la frecuencia de plasma  $\omega_{pb}$ , pero a estas frecuencias el metal es transparente para la radiación incidente y, por lo tanto, no se tendría el confinamiento de la radiación en la interfaz metal-dieléctrico; para el oro la frecuencia en la cual sucede esto es de 8,54 eV, que representa luz con una longitud de onda de 23,15 nm aproximadamente, que es muy cercano al valor de la longitud de onda de los rayos X, los cuales se observan entre 0,01 nm y 10 nm.

#### 5.4.2. Longitud de penetración y longitud de propagación para los plasmones

El campo eléctrico asociado con la formación del plasmón puede representarse como:

$$E = E_0 e^{i(k_x * x \pm k_z * z - \omega * t)} \quad (57)$$

Donde (+) representa  $z > 0$  y (−) representa  $z < 0$ , lo cual corresponde a la parte dieléctrica de la estructura y la parte metálica respectivamente, ver figura (5).

El vector de onda para la onda incidente en la interfaz (57) está dada por la siguiente relación:

$$k^2 = k_x^2 + k_z^2 = \epsilon_i \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \quad (58)$$

El índice ( $i$ ) en (Ec.58) representa, 1 si se toma la relación anterior para el dieléctrico y 2 para el metal, de estas relaciones se infiere la componente  $z$  del vector de onda del plasmón:

$$k_z = \left[ \epsilon_i \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 - k_x^2 \right]^{1/2} \quad (59)$$

Como se demostró en la sección anterior,  $k_x = k_{sp}$ , es una cantidad compleja (51), por lo tanto,  $k_z$  será compleja también, esto tiene por consecuencia que la onda a medida que se propaga en la dirección  $z$ , esto es, en la dirección perpendicular a la interfaz, se atenuará. A su vez, la amplitud del campo eléctrico decaerá tanto en el dieléctrico como en el metal, la figura (9) representa el perfil del campo eléctrico tanto para  $z > 0$  como para  $z < 0$ , donde se puede observar que la atenuación del campo es mayor en el metal que en el dieléctrico.

La distancia en la cual la amplitud del campo eléctrico (57) a decaído  $1/e$  se denomina profundidad de penetración ( $\delta$ ) o "*skin depth*". Si consideramos que la parte imaginaria de la función dieléctrica del metal es despreciable comparada con la parte real, esto es  $|\epsilon_{m1}| \gg |\epsilon_{m2}|$ , entonces las longitudes de penetración tanto para el dieléctrico  $\delta_d$  como para el metal  $\delta_m$  estarán dadas por:

$$\begin{aligned} \delta_d &= \frac{\lambda_0}{2\pi} \left[ \frac{\epsilon_{m1} + \epsilon_d}{\epsilon_d^2} \right]^{1/2} \\ \delta_m &= \frac{\lambda_0}{2\pi} \left[ \frac{\epsilon_{m1} + \epsilon_d}{\epsilon_{m1}^2} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (60)$$

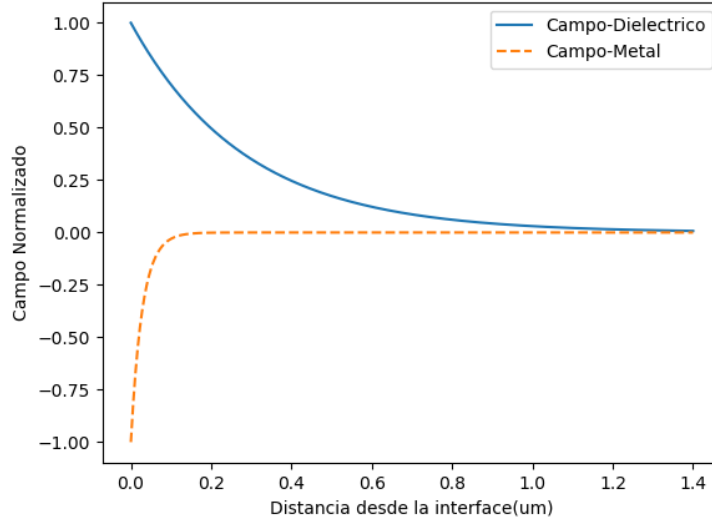


Figura 9: Perfil del campo eléctrico de la onda confinada en la interfaz metal-dieléctrico para la formación de los SPR.

Calculando la profundidad de penetración para una longitud de onda de  $633 \text{ nm}$ , en el caso de que el metal sea oro, entonces encontraremos que en el dieléctrico ( $\delta_d$ ) aproximadamente será de  $350,18 \text{ nm}$  y en el metal ( $\delta_m$ ) aproximadamente  $26,76 \text{ nm}$ <sup>18</sup>. Una interpretación plausible para estas distancias es la siguiente:

- $\delta_d$ : representa la distancia en la cual con la formación del plasmón permitiría observar la variación del índice de refracción del medio dieléctrico, esto es, que a partir de esta distancia cualquier cambio en las propiedades ópticas del medio dieléctrico no influirán en la excitación del plasmón, específicamente, la frecuencia ( $\omega_{sp}$ ) y el vector de onda ( $k_{sp}$ ) que pueda tener este.
- $\delta_m$ : Representa la distancia en la cual la luz incidente en el metal permitiría formar un SPR. Cuando el espesor de la película metálica es mayor que esta longitud, la formación del plasmón no se podrá lograr.

La longitud bajo la cual la intensidad de la onda de plasma se puede propagar por el metal, hasta que el campo eléctrico(Ec. 57) decae  $1/e$  represente la longitud de propagación del plasmón en este y toma la siguiente forma:

$$L_{sp} = \left(2k''_{sp-x}\right)^{-1} \quad (61)$$

Donde  $k''_x$  está dado por la relación(52).

En los metales,  $\epsilon_{m1}$  tiene valores grandes negativamente y valores pequeños  $\epsilon_{m2}$  (ver figura (3)), lo cual tiene como resultado longitudes de propagación grande del plasmón, por ejemplo, calculando  $L_{sp}$  para una longitud de onda de  $633 \text{ nm}$  para el oro se obtiene  $15,34 \mu\text{m}$ . Físicamente, esta longitud de propagación representa el tamaño límite en el cual se puede tener un efecto plasmónico en una estructura metal-dieléctrico.

## 5.5. Método de la matriz de transferencia

El Método de Matriz de Transferencia (MMT) es de utilidad cuando se desea estudiar la propagación de una onda bajo condiciones de fronteras periódicas o no periódicas. Este método ha sido utilizado en mecánica cuántica [29] para el estudio de electrones en pozos cuánticos, ondas electromagnéticas y ondas mecánicas. En este trabajo se aplicará para la propagación de ondas electromagnéticas en medios isotrópicos que pueden estar compuestos de varias capas (ver figura 10). Sin embargo, el MMT se vuelve difícil de aplicar cuando el número de capas es muy grande, a continuación se mostrará el caso, que se tenga tres capas apiladas y se determinará la forma de la matriz

<sup>18</sup>La razón por la cual se elige específicamente esta longitud de onda, es que experimentalmente se ha encontrado la formación de SPR con esta longitud de onda; esta longitud de onda representa la luz emitida por una láser de  $He - Ne$  [15]

de transferencia obtenida.

Considérese un sistema compuesto por tres capas como puede ser un prisma-metal-aire (ver figura 10):

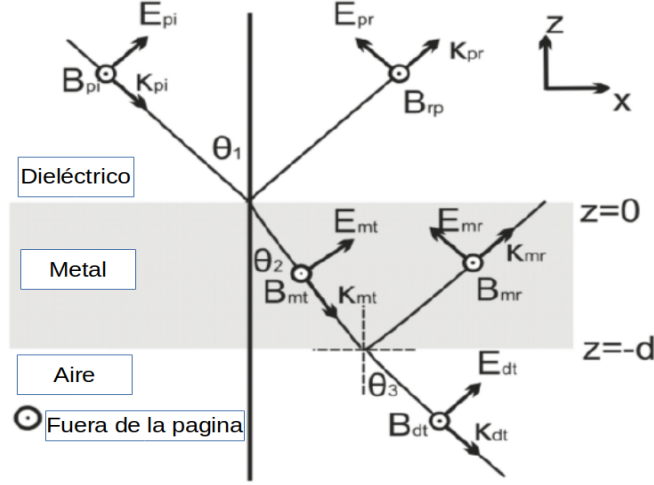


Figura 10: Sistema de capas dieléctrico-metal-aire con índices de refracción  $n_p$ ,  $n_m$  y  $n_a$ , para el dieléctrico, el metal y el aire, respectivamente.

Para una medio como el anterior, el índice de refracción estará dado por:

$$n(z) = \begin{cases} n_p & \text{if } z < 0 \\ n_m & \text{if } z \in \{0, d\} \\ n_a & \text{if } z > d \end{cases} \quad (62)$$

Con  $n(z)$  representando el índice de refracción de los tres medios, y donde  $(z)$  es la dirección en la cual cambian los medios, ver figura(10). Considerando que el medio es homogéneo e isotrópico, entonces, se debe cumplir:

$$\frac{\partial n}{\partial x} = 0 \quad y \quad \frac{\partial n}{\partial y} = 0 \quad (63)$$

La anterior relación se determina a partir de la geometría de la figura(10).

El MMT radica en la capacidad para determinar la forma que adoptan los campos electromagnéticos en la propagación de un haz de luz se transmite de un medio a otro. En las ecuaciones que se mostraran se supondrá:

- Los subíndices  $(i, r, t)$  se refieren a incidente, reflejado y transmitido.
- Los subíndices  $(p, m, d)$  se refieren a prisma, metal y dieléctrico.

En términos del vector de campo eléctrico en la dirección  $z$  se tendrá:

En  $z = 0$  los campos  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  deben cumplir con las condiciones de borde, tanto para la componente  $(x)$ , como para la componente  $(z)$ , con lo cual a partir de la figura(10) y figura(11), se deduce:

$$z = 0 \begin{cases} \cos(\theta_1)(E_{ip} - E_{rp}) & = \cos(\theta_2)(E'_{tm} - E'_{rm}) \\ n_p(E_{ip} + E_{rp}) & = \sqrt{\epsilon_m}(E'_{tm} + E'_{rm}) \end{cases} \quad (64)$$

Similarmente para  $z = d$  se tendrá:

$$z = d \begin{cases} \cos(\theta_2)(E_{tm} - E_{rm}) & = \cos(\theta_3)(E_{td} - E'_{id}) \\ \sqrt{\epsilon_m}(E_{tm} + E_{rm}) & = n_d(E_{td} + E'_{id}) \end{cases} \quad (65)$$

Los campos entre  $z = 0$  y  $z = d$  solamente difieren en la fase, y representan la propagación de la onda en el metal:

$$\begin{pmatrix} E'_{tm} \\ E'_{rm} \end{pmatrix} = P_2 \begin{pmatrix} E_{tm} \\ E_{rm} \end{pmatrix} \quad (66)$$

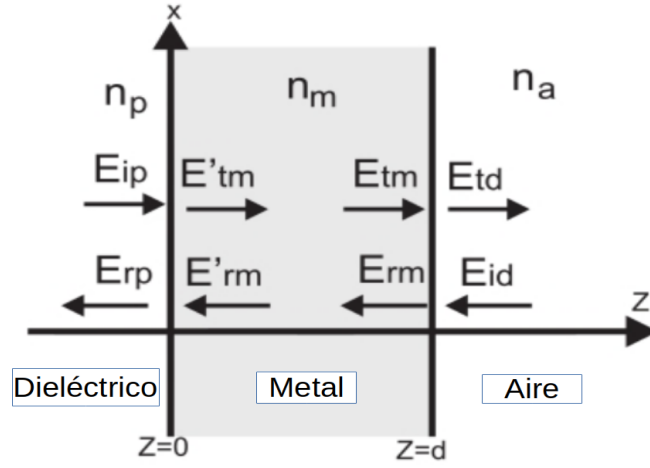


Figura 11: Representación de las componentes del campo eléctrico reflejada ( $r$ ) y transmitida ( $t$ ) en la dirección  $z$ , en cada región de la interfase, para una estructura estratificada de tres medios: dieléctrico-metal-aire, donde  $n_p$  representa el índice de refracción del medio donde viene la onda incidente,  $n_m$  representa el índice de refracción del metal y  $n_a$  representa el índice de refracción del aire.

Donde  $P_2$  representa la matriz de propagación del haz entre  $z = 0$  y  $z = d$ :

$$P_2 = \begin{pmatrix} e^{i(K(z)*d)} & 0 \\ 0 & e^{-i(K(z)*d)} \end{pmatrix} \quad (67)$$

$K(z)$  toma la forma:

$$K(z) = \sqrt{\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \epsilon_m - k_z^2} \quad (68)$$

$$k_z = \frac{2\pi}{\lambda} n_p \sin(\theta_1)$$

Para  $z = 0$  se tendrá:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \cos(\theta_1) & -\cos(\theta_1) \\ n_p & n_p \end{pmatrix}}_{D_1} \begin{pmatrix} E_{ip} \\ E_{rp} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos(\theta_2) & -\cos(\theta_2) \\ \sqrt{\epsilon_m} & \sqrt{\epsilon_m} \end{pmatrix}}_{D_2} \begin{pmatrix} E'_{tm} \\ E'_{rm} \end{pmatrix} \quad (69)$$

Similarmente para  $z = d$ :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \cos(\theta_2) & -\cos(\theta_2) \\ \sqrt{\epsilon_m} & \sqrt{\epsilon_m} \end{pmatrix}}_{D_3} \begin{pmatrix} E_{tm} \\ E_{rm} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos(\theta_3) & -\cos(\theta_3) \\ n_a & n_a \end{pmatrix}}_{D_4} \begin{pmatrix} E_{td} \\ E_{id} \end{pmatrix} \quad (70)$$

Los  $D_i$  con  $(i = 1, 2, 3, 4)$ , se les conoce como las “Matrices Dinámicas”. Las cuales determinan la forma en que se acoplan los campos en las interfaces.

Se puede relacionar el campo  $\vec{E}$  incidente de la onda, con el valor del campo  $\vec{E}$  en  $z = d$  dentro del metal como sigue:

$$\begin{pmatrix} E_{ip} \\ E_{rp} \end{pmatrix} = \underbrace{D_1^{-1} D_2}_{D_{12}} \begin{pmatrix} E'_{tm} \\ E'_{rm} \end{pmatrix} \quad (71)$$

$$\begin{pmatrix} E_{ip} \\ E_{rp} \end{pmatrix} = D_{12} P_2 \begin{pmatrix} E_{tm} \\ E_{rm} \end{pmatrix} \quad (72)$$

A partir de lo anterior se concluye:

$$\begin{pmatrix} E_{ip} \\ E_{rp} \end{pmatrix} = \underbrace{D_{12} P_2 D_{34}}_M \begin{pmatrix} E_{td} \\ E_{id} \end{pmatrix} \quad (73)$$

Se puede observar, que la matriz dinámica  $D_{12}$  sera:

$$D_{12} = D_1^{-1} D_2 = \begin{pmatrix} \frac{\cos(\theta_2)}{2\cos(\theta_1)} + \frac{\sqrt{\epsilon_m}}{2n_p} & \frac{\sqrt{\epsilon_m}}{2n_p} - \frac{\cos(\theta_2)}{2\cos(\theta_1)} \\ \frac{\sqrt{\epsilon_m}}{2n_p} - \frac{\cos(\theta_2)}{2\cos(\theta_1)} & \frac{\cos(\theta_2)}{2\cos(\theta_1)} + \frac{\sqrt{\epsilon_m}}{2n_p} \end{pmatrix} \quad (74)$$

La matriz dinámica  $D_{34}$  queda:

$$D_{34} = D_3^{-1} D_4 = \begin{pmatrix} \frac{\cos(\theta_3)}{2\cos(\theta_2)} + \frac{n_a}{2\sqrt{\epsilon_m}} & \frac{n_a}{2\sqrt{\epsilon_m}} - \frac{\cos(\theta_3)}{2\cos(\theta_2)} \\ \frac{n_a}{2\sqrt{\epsilon_m}} - \frac{\cos(\theta_3)}{2\cos(\theta_2)} & \frac{\cos(\theta_3)}{2\cos(\theta_2)} + \frac{n_a}{2\sqrt{\epsilon_m}} \end{pmatrix} \quad (75)$$

Se define entonces la matriz  $M$  de la siguiente manera:

$$M = D_{12} P_2 D_{34} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \quad (76)$$

La anterior matriz se conoce como la *matriz de transferencia*, y permite determinar la forma que adoptan los campos de la onda al pasar de un medio a otro, esta es la razón por la cual se le denomina matriz de transferencia<sup>19</sup>. Se debe tener presente que esta matriz es compleja, cuyas componentes dependerá únicamente de las propiedades ópticas de los medios involucrados, y de la dirección que describa el haz que transporta los campos electromagnéticos, cuando pasa de una capa a otra en el medio estratificado.

De lo anterior podemos expresar los campos en el prisma, con los campos en el aire, de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} E_{ip} \\ E_{rp} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_{td} \\ E_{id} \end{pmatrix} \quad (77)$$

Se observa que:

$$\begin{aligned} E_{ip} &= M_{11} E_{td} + M_{12} E_{id} \\ E_{rp} &= M_{21} E_{td} + M_{22} E_{id} \end{aligned} \quad (78)$$

Los coeficientes de transmisión y reflexión estarán dados por:

$$r = \frac{E_{rp}}{E_{ip}} \quad t = \frac{E_{td}}{E_{ip}} \quad (79)$$

Considerando que  $E_{id} = 0$ , lo que representa físicamente la anterior condición es que no incide ninguna onda en el último medio que para el caso de estudio es el aire, por lo tanto, se tendrá:

$$E_{ip} = M_{11} E_{td} \quad E_{rp} = M_{21} E_{td} \quad (80)$$

Los coeficientes  $r$  y  $t$  adquieren la siguiente forma:

$$r = \frac{M_{21}}{M_{11}} \quad t = \frac{1}{M_{11}} \quad (81)$$

Los anteriores coeficientes se relacionan con los coeficientes de Fresnel<sup>20</sup> como:

$$\begin{aligned} R &= |r|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2 \\ T &= \frac{n_a^2 v_3}{n_p^2 v_1} |t|^2 = \frac{n_a \cos(\theta_3)}{n_p \cos(\theta_1)} \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2 \end{aligned} \quad (82)$$

<sup>19</sup>Ver el trabajo de [30], en la cual se muestra en detalle los cálculos y deducciones de las relaciones expuestas en esta sección

<sup>20</sup>Los coeficientes de Fresnel (en honor al físico francés Augustin Fresnel) son unos parámetros que permiten medir la relación entre los campos eléctricos transmitido y reflejado cuando una onda experimenta un cambio en las propiedades del medio por el que se propaga.

## 6. Objetivos

### 6.1. Objetivo General

Determinar numéricamente las longitudes de onda características de operación de un OPT (Optical Plasmon Transducer).

### 6.2. Objetivos Específicos

- Determinar los parámetros más relevantes en la fabricación y funcionamiento óptimo del OPT (parámetros geométricos y medioambientales).
- Explorar el modelo más apropiado para identificar las longitudes de onda del plasmón superficial óptico.
- Identificar el funcionamiento del analito en el proceso de sensado.

## 7. Resultados y discusión

Con la idea de determinar numéricamente las longitudes de onda características de operación y los parámetros más relevantes de fabricación y funcionamiento de un sensor óptico en forma de U (ver figura 12), basado en la Resonancia de Plasmón Superficial; se llevaron a cabo una serie de rutinas de programación, en esta sección se mostrarán todos los resultados pertinentes.

El sensor a modelar numéricamente tiene la siguiente geometría:

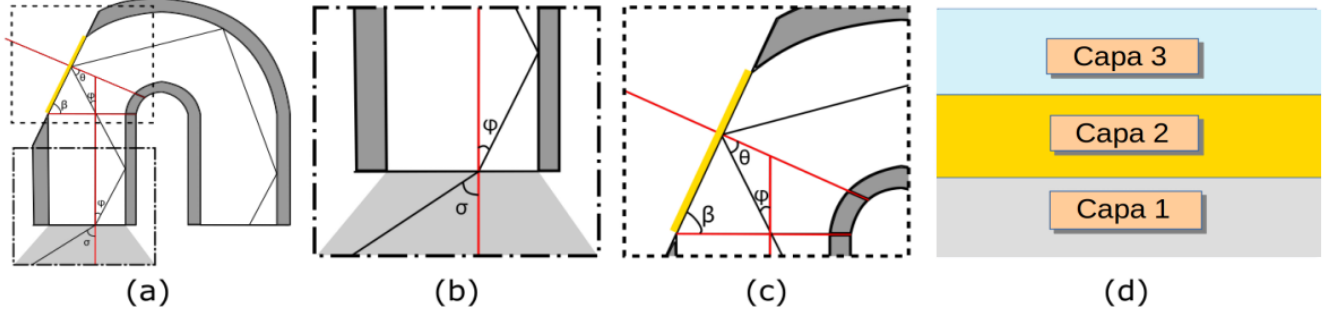


Figura 12: Diagrama del sensor óptico a modelar. a) Geometría del sensor donde se observa el pulimento del mismo, b) ángulo de incidencia que hace la luz cuando ingresa en la fibra óptica, c) ángulo de incidencia que hace la luz sobre la película de oro y d) representación gráfica de los medios que componen el sensor: (medio 1) lo conforma el dieléctrico por el cual se propagará la luz que excitará el sensor, el (medio 2) lo conforma la película de oro, el medio (medio 3) lo representa el último medio semi-infinito.

En la gráfica de la figura (12) cada una de las capas del sensor esta representa por:

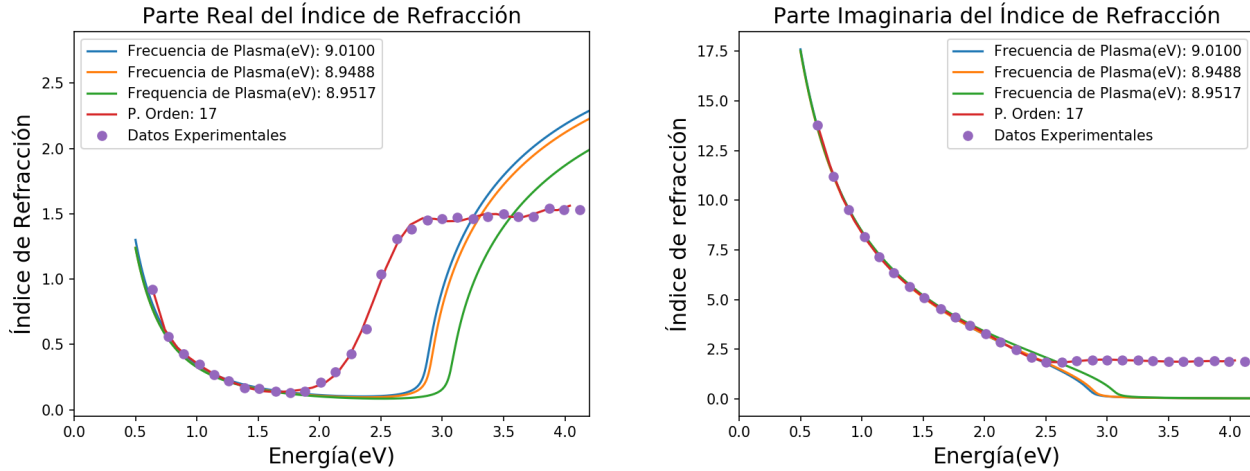
- Capa 1(C1): Medio dieléctrico donde se propaga inicialmente la luz, en el sistema de sensado esta capa la representara la fibra óptica.
- Capa 2(C2): Representa la película de metal que se deposita sobre la primera capa.
- Capa 3(C3): Última capa del sensor representada por el medio semi-infinito en contacto con el sensor, por ejemplo, este medio puede ser agua donde se encontrarán las moléculas que se desean monitorear.

Teniendo en cuenta que se desea conocer las longitudes de onda de funcionamiento del sensor, entonces se debe estudiar el proceso de transmisión de la luz para cada longitud de onda a través de los diferentes medios del mismo [25,26], para ello fue indispensable conocer el índice de refracción o en su defecto la respuesta dieléctrica de cada material que conforma las diferentes estructuras del sensor. Por lo tanto, se procedió a determinar la respuesta óptica de cada medio del sensor, en especial la del oro, ya que la respuesta dieléctrica de este es una cantidad compleja. Una vez se tiene la respuesta dieléctrica, se compara con el índice de refracción calculado para el oro usando el modelo de Lorentz-Drude para distintas frecuencias de plasma (ver sección 5.3), con los datos experimentales para el mismo [27]. Los datos del índice de refracción del oro para frecuencias en el espectro óptico se obtienen interpolando el índice de refracción reportado <sup>21</sup>, y se compararon con el cálculo teórico según el modelo de Lorentz-Drude [23], los resultados se muestran en la figura (13).

Se puede observar (figura 13) de los resultados de la interpolación y el cálculo teórico del índice de refracción tanto real como imaginario lo siguiente:

- Para frecuencias por debajo de 2,0 eV la parte real del índice de refracción del oro en el modelo de Lorentz-Drude coincide con los datos experimentales.
- Para frecuencias por encima de los 2,0 eV la parte real del índice de refracción del oro calculada con el modelo de Lorentz-Drude, difiere de los datos experimentales del índice de refracción del oro.

<sup>21</sup>Las frecuencias se expresan en (eV), que estrictamente hablando es una unidad de energía, esta equivale a la necesaria para mover un electrón una distancia en la cual la diferencia de potencial cambia un volt, en Joule, esta cantidad equivaldría a  $1,602176 \times 10^{-19} J$ , si afirmamos que un fotón tiene una energía en (eV), entonces la frecuencia estaría asociada en términos de esta unidad de energía, donde el factor de conversión para la frecuencia sería la constante de Plank, por lo tanto, cuando se habla de (eV) se hace referencia precisamente a la frecuencia.



(a) Parte real de índice de refracción del oro para frecuencias entre 0,4 eV a 4,2 eV.

(b) Parte imaginaria del índice de refracción del oro para frecuencias entre 0,4 eV a 4,2 eV

Figura 13: En las gráficas a y b se observa, además de los datos experimentales reportados en la literatura (puntos morados) [27] para el índice de refracción del oro, el cálculo del índice de refracción usando el modelo de Lorentz-Drude (Curvas azul, naranja y verde) y la interpolación de los datos experimentales con un polinomio de grado 17 (curva roja).

- Para frecuencias por debajo de los 2,5 eV para la parte imaginaria del índice de refracción, se observa una buena correspondencia entre los datos tanto experimentales con los datos teóricos con base en el modelo de Lorentz-Drude.
- Para frecuencias por encima de los 2,5 eV la parte imaginaria del índice de refracción difiere de los datos teóricos, con respecto los datos experimentales para el mismo.

El rango de longitudes de onda en el cual se desea que el sensor funcione esta entre los 350 nm a los 750 nm que comprende la luz visible [24–26]<sup>22</sup>.

Para el análisis de propagación de la luz a través de los distintos medios del sensor es importante conocer el índice de refracción de cada medio, en especial del oro, donde la parte real del mismo, da cuenta de la respuesta óptica; por tal motivo el cálculo teórico de la parte real de dicho índice no es el adecuado para tal propósito, debido a su notable diferencia con los datos experimentales (ver figura 13a), con lo cual se buscó mejorar la interpolación de los datos experimentales usando splines [31], en la figura(14) se muestran los resultados:

Como se puede observar de la figura (14), el proceso de interpolación usando spline<sup>23</sup> muestra una tendencia respecto a los datos experimentales, lo cual mejora la estimación del índice de refracción del oro, comparado con el método de interpolación polinomial. Se debe resaltar que de no conocerse la respuesta óptica del oro, en especial la parte real del mismo, no es posible determinar frecuencias de funcionamiento del sensor, ya que la formación de los SPR depende de esta respuesta óptica (ver sección 5.4), razón por la cual, este trabajo previo de interpolación es tan importante para los resultados que se mostraran en las siguientes secciones.

Una vez se logra aproximar el índice de refracción del oro a distintas frecuencias, se procede a comparar la parte real del índice de refracción del oro con el índice de refracción de un dieléctrico, que para la rutina de programa se fijó en 1,49<sup>24</sup>. Como se puede observar de la figura(15a), la parte real del índice de refracción del oro toma valores más pequeños, que el índice de refracción del dieléctrico, cuando la longitud de la onda de la luz que se propaga

<sup>22</sup>. En eV esto sería 1,4 eV a 4,1 eV, donde 1,4 eV representa la longitud de onda 750 nm y 4,1 eV representa la longitud de onda de 350 nm. Ver la sección de anexos para el cálculo detallado.

<sup>23</sup>spline: En el subcampo matemático del análisis numérico, un spline es una curva diferenciable definida en porciones mediante polinomios.

<sup>24</sup>Se utiliza este valor para el índice de refracción del dieléctrico, ya que comercialmente se puede conseguir fibras ópticas con este índice.

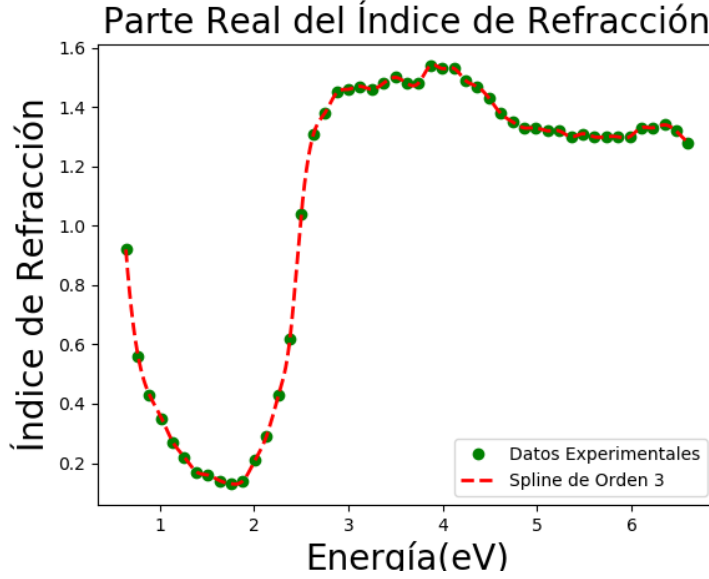
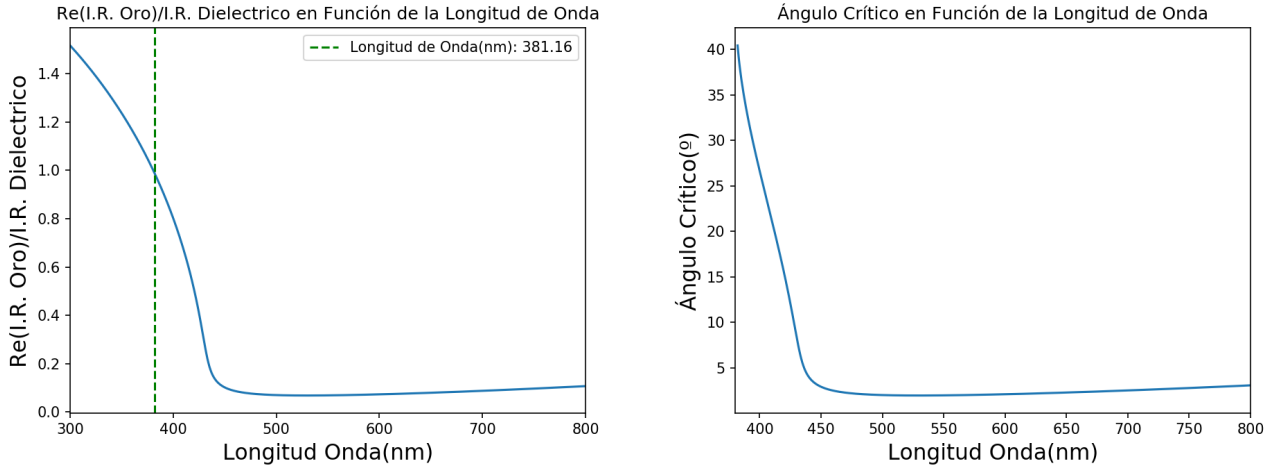


Figura 14: Interpolación de los datos experimentales reportados en la literatura (puntos verdes) [27] para la parte real del índice de refracción del oro a distintas frecuencias utilizando splines (línea punteada en rojo interpolación).

por la capa 1 es de  $381,16nm$  o mayor, bajo esta condición la estructura permitirá sustentar la formación de una onda evanescente, fenómeno el cual es esencial para la formación de la SPR. Con la idea de observar los respectivos ángulos críticos a partir de los cuales se puede tener la onda evanescente, se realiza la figura (15b), es importante notar que existe una zona donde el índice de refracción del oro no presenta una variación apreciable, esto se observa en la figura(15a) para longitudes de onda por encima de los  $430nm$  aproximadamente, hasta prácticamente los  $800nm$ . De lo anterior se puede inferir entonces que a partir de los  $430nm$  el ángulo crítico para la formación de la onda evanescente, es prácticamente similar para este rango de longitudes de onda.



(a) Comparación de la parte real del índice de refracción del oro, con un medio dieléctrico con un índice de refracción 1,49.

(b) Ángulo crítico en función de la longitud de onda, para una bicapa dieléctrico-oro, donde índice de refracción del dieléctrico toma un valor de 1,49.

Figura 15: a) Comparación de la parte real del índice de refracción del oro, con un medio dieléctrico con un índice de refracción 1,49. b) Ángulo crítico en función de la longitud de onda, para una bicapa dieléctrico-oro, donde índice de refracción del dieléctrico toma un valor de 1,49.

## 7.1. Estudio de la reflectancia en función del ángulo de incidencia de la luz sobre el sensor a 633 nm de longitud de onda

El ángulo de incidencia de la luz que se propaga por la capa 1 en contacto con la superficie metálica es determinante para la formación del fenómeno de SPR, la figura (12-c) permita entender con mayor facilidad la incidencia de la luz con la película metálica del sensor. Con la idea de investigar en primera instancia como se puede observar la formación de un plasmón cuando en la capa 2 incide un haz de luz con una sola longitud de onda (633 nm) y a distintos ángulos, a continuación se muestran los resultados obtenidos para lograr lo anterior.

Inicialmente, se calcula la reflectancia ( $R$ ) de la luz reflejada en la película metálica (ver figura 12-c), usando el método de la matriz de transferencia [32]<sup>25</sup>, en la gráfica de la figura (16) se muestra la reflectancia ( $R$ ) en función del ángulo de incidencia de una onda cuya longitud de onda es de 633 nm; la razón por la que se usa esta longitud de onda para este cálculo preliminar, se debe a que experimentalmente se ha comprobado que el oro muestra la formación de un SPR a esta longitud, donde esta luz es emitida por un láser de He-Ne [15], por lo tanto, los cálculos realizados utilizando el método de "TMM" deben mostrar la formación de un plasmón a esta longitud de onda; en el cálculo, se hace necesario saber cuál es la permitividad eléctrica del oro a esta longitud de onda o en su defecto el índice de refracción [27, 33], razón por lo cual los resultados de la figura (14) son importantes. Podemos observar que la reflectancia presenta un punto donde la intensidad de la luz decae (línea punteada verde), esto se debe a la formación del plasmón, donde se obtiene que dicha absorción sucede para un valor de  $\theta = 44,13^\circ$ , el espesor de la película metálica en la simulación fue de 50 nm, en una sección posterior se mostrara que este valor está en el rango de espesores óptimos de funcionamiento del sensor.

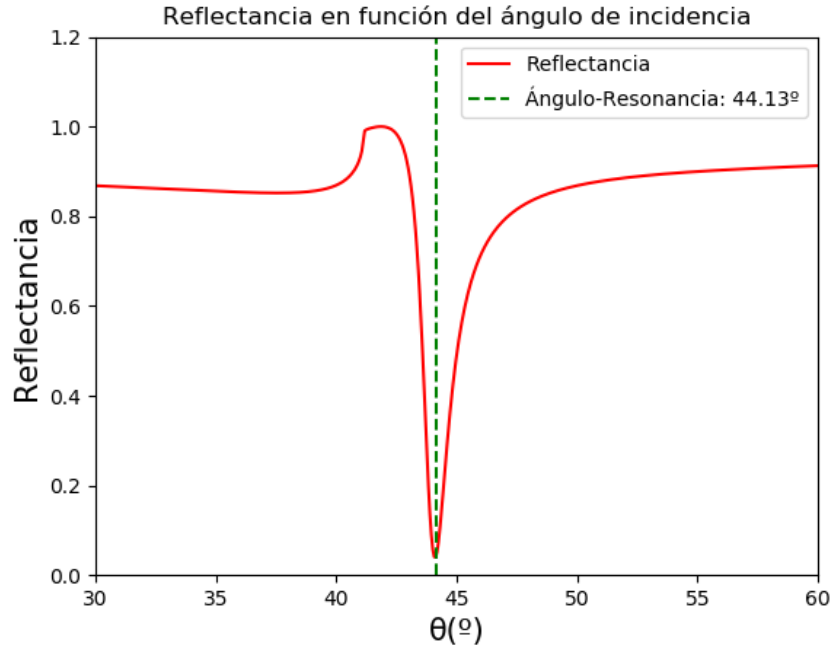


Figura 16: Curva de reflectancia en función del ángulo de incidencia, para una simulación con los siguientes parámetros: índice de refracción del primer medio 1,49, espesor de la película metálica de oro es de 50 nm, longitud de onda de la luz incidente de 633 nm, valor de la permitividad eléctrica del oro de  $\epsilon_{Au} = -11,23 + 0,77j$

La formación del plasmón aparece como una absorción de la luz por parte de la película metálica del sensor y a un ángulo específico debido a la oscilación colectiva y coherente de los electrones de la superficie del metal. La importancia de este cálculo numérico radica principalmente en que permite corroborar lo obtenido experimentalmente utilizando el método de Krestchmann [15, 22] y adicional permite construir la rutina base de este trabajo de investigación.

<sup>25</sup>Este método constituye la base de estudio del presente trabajo. Una librería fundamental para el desarrollo de los programas y gráficas de este trabajo de investigación, es la librería de python de código abierto llamada "tmm", escrita por Steven J. Byrnes.

Para comparar las distintas curvas reflectancia en función del ángulo de incidencia o longitud de onda, relacionadas con la formación de los plasmónes, y así discriminar la intensidad con la que se forman los plasmónes se utilizará un parámetro para la precisión de detección o "Detection Accuracy" de los plasmones, el cual es proporcional al inverso de la anchura a media altura (del ingles Full Width at Half Maximum) de la curva de reflectancia obtenida [13], este parámetro se define como:

$$DA \propto \frac{1}{\Delta}, \quad (83)$$

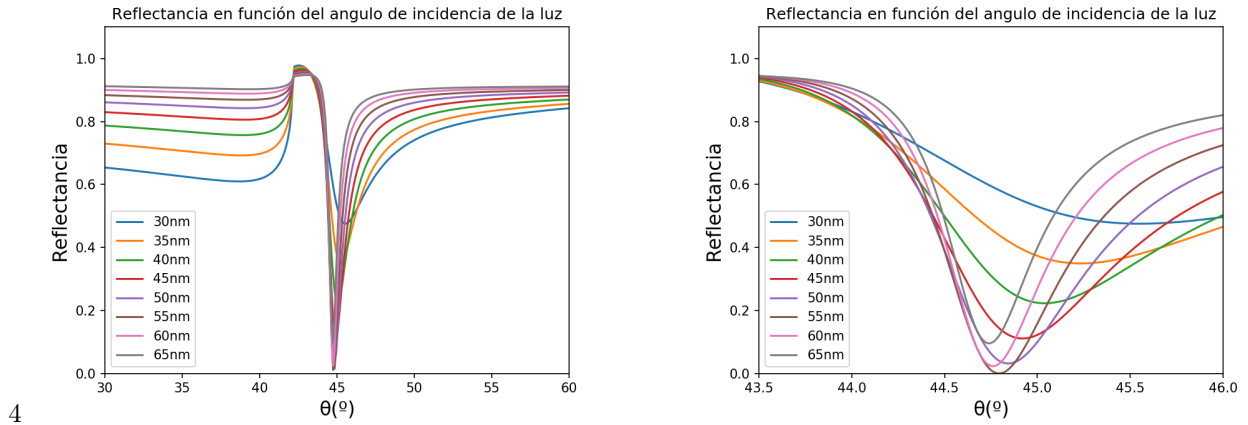
Siendo  $\Delta$  la anchura a media altura de la curva de reflectancia en función del ángulo de incidencia o la longitud de onda.

Se puede observar que entra mayor sea DA, menor será  $\Delta$ , lo cual indicaría una formación de un plasmón, cuya curva de reflectancia ( $R$ ) mostraría una curva pronunciada en la absorción. Específicamente a lo anterior es a lo que se le asocia una formación de plasmón de "gran intensidad", como lo observado en la figura (16). En el caso contrario, donde DA sea pequeño, indicaría que la formación del plasmón, observado en la curva de reflectancia con muy poca absorción de la luz, para este caso se referiría a la formación del plasmón de "baja intensidad".

## 7.2. Dependencia de la formación de los SPR en función del espesor de la capa metálica del oro

En la sección anterior se utilizó el método de MMT aplicado a la estructura que se desea modelar, donde se observó el fenómeno de SPR; en esta sección se procede a estudiar la formación de los SPR cuando el espesor de la película metálica de oro varía, a continuación se presentan los resultados.

En primera instancia se realizó una rutina numérica para mostrar la dependencia de reflexión de la luz en función del ángulo de incidencia sobre la película metálica (capa 2), este cálculo numérico se realiza para diferentes espesores de la capa metálica, los resultados se muestran en la figura(17); se debe tener presente que es un parámetro importante en la matriz de transferencia, específicamente la matriz de propagación de la onda en la película metálica(ver sección 5.5).



(a) Dependencia de la reflectancia con el espesor del segundo medio (película metálica), cuando esta variaba desde (30 – 65) nm

(b) Dependencia de la reflectancia con el espesor del segundo medio (película metálica), cuando esta variaba desde (30 – 65) nm

Figura 17: Estudio de la reflectancia(R) en función del ángulo de incidencia de la luz en el sensor, tomando distintos espesores de la película metálica de oro. Los parámetros de la simulación fueron los siguientes: sensor compuesto por tres capas (dieléctrico-película de oro-aire), donde el dieléctrico presentaba un índice de refracción de 1,42 y la longitud de onda de la luz incidente sobre el sensor fue de 633 nm, para una polarización tipo TM de la luz incidente en el metal.

Como se observa de la figura (17), la intensidad de formación de los SPR varía a medida que cambia el espesor de la película de oro, lo cual está de acuerdo con la teoría<sup>26</sup> y resultados experimentales previos [15]; se encuentra de este resultado, que un valor de espesor óptimo para el oro está entre 40 nm a 60 nm, donde se puede observar que la formación de los plasmones con este rango óptimo, el DA será mayor que para espesores menores a 40 nm, con lo cual, se pone de manifiesto que el espesor de la película metálica es un parámetro importante para el funcionamiento del sensor.

<sup>26</sup>ver sección del marco teórico asociado con la longitud de penetración

### 7.3. Dependencia de la formación de los SPR con la longitud de onda de la luz incidente sobre la película metálica de oro

En la anterior sección se estudió la dependencia de la formación de los plasmónes en el sensor en función del espesor de la película metálica de oro, pero como se mencionó, experimentalmente se puede investigar es la luz reflejada en la película metálica, por lo tanto, con la idea de encontrar un rango de frecuencias donde se presente una formación de SPR, se realizó una rutina de programación para estudiar la respuesta del sistema estratificado de la figura (12) a diferentes longitudes de ondas, para un espesor de  $50\text{ nm}$ , un índice de refracción del primer medio de 1,49 y tomando el último medio como vacío. Se escoge este valor del espesor para la película metálica porque, de acuerdo con los resultados de la sección anterior, dicho espesor promueve una formación de plasmónes.

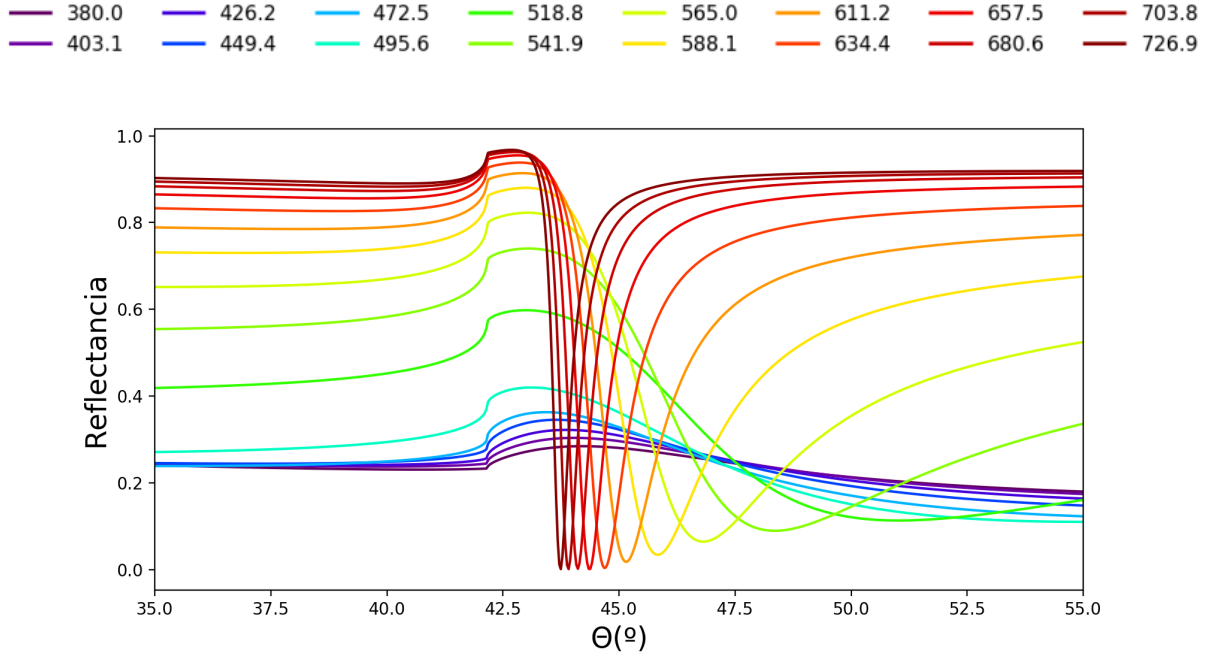


Figura 18: Reflectancia en función del ángulo de incidencia de la luz desde 35 hasta 55, el sensor a modelar estaba compuesto por tres capas (dieléctrico-película metálica-aire) y el espesor de la película metálica fue de  $50\text{ nm}$ , para una polarización tipo TM de la luz incidente en el metal.

En la figura(18) se muestra los resultados de la dependencia de los SPR con la longitud de onda, donde el color que se observa en cada curva corresponde a la longitud de onda de la luz incidente sobre la película metálica de oro, para distintos ángulos de incidencia. De esta gráfica identificamos un rango de longitudes de onda que va desde los  $550\text{ nm}$  hasta  $750\text{ nm}$ , en este rango, es donde se genera la formación de los SPR con una absorción de luz considerable, representada por un pico más pronunciado en la curva. Este resultado de suma importancia, ya que la sensibilidad del sensor es influenciada por la formación de los plasmónes con cada longitud de onda, debido a que, sobre la película de oro no solamente incide luz que estimula la formación de los SPR, si no que también, puede incidir luz que a pesar de tener la polarización adecuada<sup>27</sup>, no puede generar la coincidencia de fase con el vector de onda del plasmón a formar, por lo cual, las características de la fuente de luz de la radiación incidente son muy importantes para lograr en mayor medida esta coincidencia de fase; de los resultados de la figura(18) se observa que para longitudes de onda desde los  $565,0\text{ nm}$  a los  $595,8\text{ nm}$  la formación de los SPR se genera para ángulos entre 45 y 47, mientras que, para longitudes de onda desde los  $611,2\text{ nm}$  a los  $734,6\text{ nm}$  la formación de los SPR se presenta en ángulos entre 43 y 45, también se evidencia que para longitudes de onda por debajo de los  $400,0\text{ nm}$ , la formación de un SPR no es posible, ya que como se observa en la figura (15a), para longitudes de onda por debajo de este valor, el índice de refracción del oro es mayor que el del dieléctrico y, por lo tanto, no sería posible obtener la onda evanescente en la estructura del sensor.

<sup>27</sup>Para la formación de un plasmón superficial, la polarización de la luz con respecto al plano de incidencia debe ser TM

#### 7.4. Dependencia de la formación de los SPR con el índice de refracción de la capa 1 del sensor

En esta sección se muestra la influencia del índice de refracción del medio 1 (fibra óptica) en la formación y comportamiento de los plasmónes; se realizó una rutina de programación, la cual consistió en variar el índice de refracción de la capa 1, donde se evalúa para diferentes ángulos la reflectancia de la luz sobre la película metálica, con lo cual se obtiene el resultado mostrado en la figura(19).

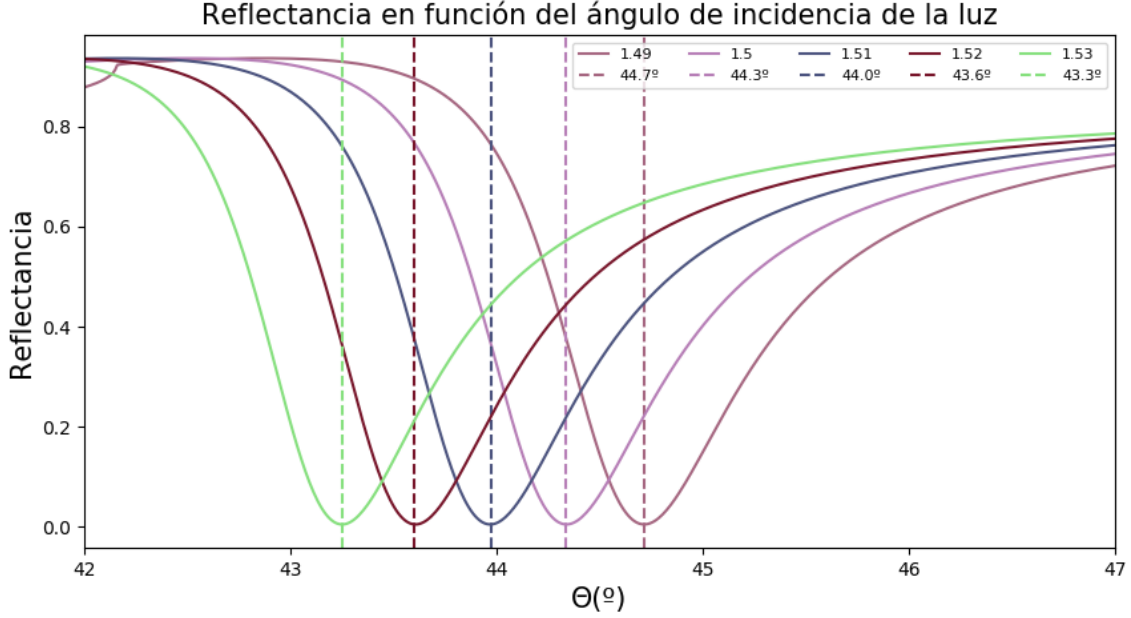


Figura 19: Reflectancia en función del ángulo de incidencia. Las curvas mostradas se obtuvieron con los siguientes parámetros de simulación: primer medio con índice de refracción variable, espesor de la película metálica de 50 nm y con un haz cuya longitud de onda es de 633 nm.

En la figura (19) se presenta el gráfico de reflectancia en función del ángulo de incidencia de la luz en el sensor, vemos que al aumentar el valor del índice de refracción del medio 1 desde 1,49 hasta 1,53 los picos de intensidad de los plasmónes se desplazan a ángulos más pequeños. Este punto es de importancia, si se tiene en cuenta que la formación de los plasmónes se presenta en ciertos modos de propagación de la luz, por ejemplo, como se observó anteriormente para una longitud de onda de 633 nm y para un medio dieléctrico con un índice de refracción de 1,49, el punto de máxima absorción se da en 44,7. Dicho esto, si se desea que la formación del plasmón se presente a un menor ángulo, el índice de refracción del primer medio debe aumentar, también se puede hacer el mismo análisis para el caso contrario. Como se mencionó anteriormente, el ángulo específico donde se genera la resonancia depende específicamente de las propiedades ópticas de los medios, lo cual está expresado por de la relación de dispersión (49).

## 7.5. Estudio de la formación de los SPR con el ángulo de incidencia de la luz sobre la película metálica de oro

Recordemos que para la formación de los plasmónes en la interfaz del sensor, primero la luz tiene que tener una polarización TM, debido a que, la polarización TE de la luz no promueve formación alguna de plasmónes (ver sección 5.4); pero adicional a esta condición, también se debe cumplir que la dirección de incidencia de la luz con la película metálica, debe ser tal que se forme la onda evanescente que promueve la generación de un plasmón (49), lo anterior representa la condición más importante para el funcionamiento del sensor. En esta sección se estudia la formación de los SPR en función del ángulo de incidencia para la luz sobre la película metálica donde se supondrá que la capa 1 del sensor es la fibra óptica, la cual para la longitud de ondas en el espectro visible, la fibra en contacto con el capa metálica se comporta como una interfaz plana semi-infinita.

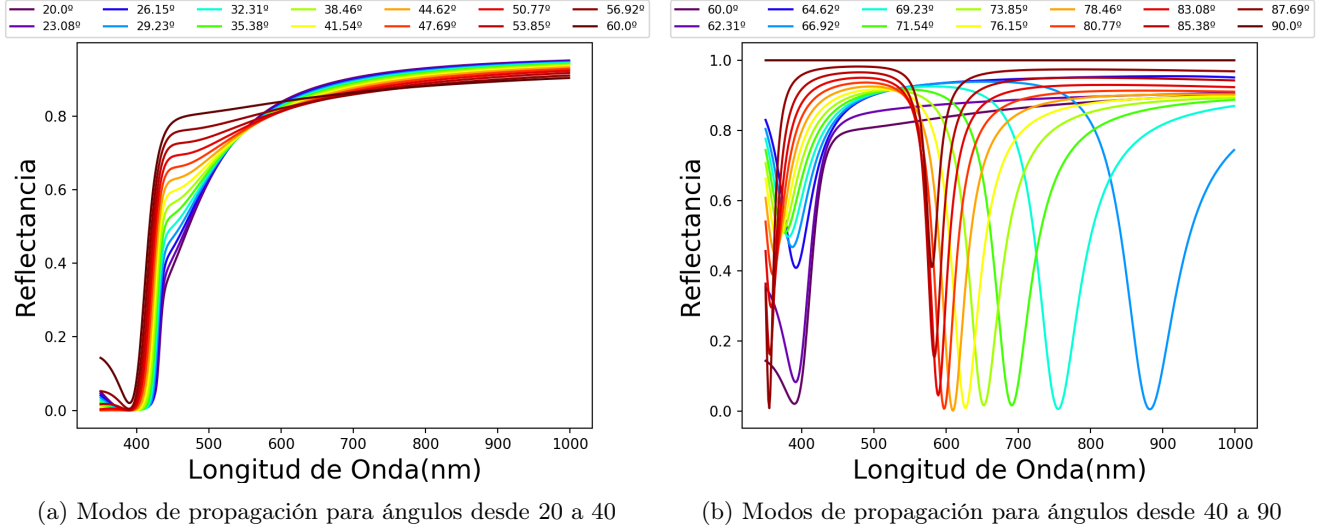


Figura 20: Reflectancia en función de la longitud de onda, para modos de propagación de la luz con ángulos de incidencia desde 20 a 90, el sensor a modelar estaba compuesto por tres capas (dieléctrico-película metálica-agua) y el espesor de la película metálica fue de 50 nm.

En la figura(20) se observa que al propagarse la luz con ángulos de incidencia sobre el sensor de 20 hasta 90, cada uno tiene una contribución en la formación de los plasmónes, por ejemplo para ángulos desde 20 a 40 aproximadamente<sup>28</sup> la formación de los plasmónes no es muy pronunciada, lo que evidencia que no se cumple satisfactoriamente la condición de resonancia, en donde el vector de onda de la luz incidente no está acoplado con el vector de onda del plasmón creado, en realidad se presenta una mayor reflexión de la luz cuando incide en la película metálica del sensor. También es interesante notar que al presentarse una la longitud de onda por debajo 400 nm para la luz incidente, esta es prácticamente transmitida en su totalidad, porque para frecuencias cercanas a la frecuencia de plasma del oro, la radiación pasa sin atenuación alguna por la película metálica, ya que el oro pierde completamente su respuesta eléctrica a estas frecuencias y él mismo se comportaría más como un medio transparente (ver sección 4.3). Las frecuencias de la luz en la cual sucede lo anterior en el caso del oro se da a partir de los 8,54 eV o 145,5 nm.

Adicionalmente, se observa ángulos de propagación de la luz entre 40 a 90 en los cuales se empieza producir de plasmónes cuyo DA asociado a la curva de reflectancia es grande (ver figura 20)<sup>29</sup>, esto sucede por el acople entre el vector de onda de la luz incidente con el vector de onda del plasmón formado, para este caso, el campo eléctrico genera un mayor desplazamiento de carga y por ende una mayor cantidad de electrones oscilando en la superficie del metal. Se debe resaltar también de la figura 17b, que justo para ángulos cercanos a 90 no hay formación de plasmón alguno, como consecuencia de que la luz no presenta incidencia alguna con la película metálica a este ángulo. Es de notar que algunos modos de propagación de la luz favorecen la formación de los plasmónes a cierto rango de frecuencias más que a otros, por ejemplo, para ángulos de incidencia entre 60-70 (ver figura 20) los plasmónes se

<sup>28</sup>Se menciona "aproximadamente", ya que una interfaz como la descrita con un espesor de película delgada más pequeña que la longitud de penetración no mostraría formación de SPR alguno (ver sección 4.4)

<sup>29</sup>En la sección 7.1, se define la precisión de detección o DA, para la formación de los plasmones

presentan a un rango de longitudes de onda superior  $450 \text{ nm}$  e inferior  $500 \text{ nm}$ . Como se mencionó anteriormente, se debe tener en cuenta el espectro de la fuente de luz para excitar los plasmónes, si se quiere observar una adecuada formación de éstos, por lo tanto, la fuente de luz debe tener su espectro centrado en este rango de longitudes.

Es importante observar que para el caso en que los ángulos de incidencia estén entre  $40$  y  $90$ , se puede dar la formación de un pico de absorción debido a la formación del plasmón a longitudes de onda por debajo de los  $400 \text{ nm}$ , lo anterior se debe a que la estructura de la figura 12 puede sustentar la formación de plasmónes en ambas superficies de la película de oro, lo que resulta en dos condiciones de resonancia en vez de una [13,14], lo cual estaría relacionado con el acoplamiento de las oscilaciones de los electrones en ambas superficies del metal.

Debido a la geometría del sensor (ver figura(12)) no es posible barrer todos los ángulos de incidencia con la luz que ingresa en la fibra óptica (ver figura 21), lo cual se puede observar de la figura(20), de hecho se puede demostrar (ver sección de anexos) que la relación entre el ángulo de incidencia  $\theta$  en la película metálica con el ángulo de pulimento  $\beta$  y el ángulo de transmisión  $\varphi$  del haz en la fibra óptica, están dados por:

$$\beta = \theta + \varphi, \quad (84)$$

y como la fibra óptica presenta una aceptación de la luz, la cual depende de la apertura numérica de la misma, entonces se puede mostrar que el ángulo más grande  $\varphi_{max}$  que hará un haz al entrar en la fibra óptica estará dado por:

$$\text{sen}(\varphi_{max}) = NA, \quad (85)$$

donde  $NA$  representa la apertura numérica de una fibra, con lo cual:

$$NA = \sqrt{n_n^2 - n_c^2}, \quad (86)$$

en este caso  $n_n$  representa el índice de refracción del núcleo de la fibra óptica y  $n_c$  el índice de refracción del revestimiento de la misma, por ejemplo en el caso de que se tenga una fibra óptica con un  $NA$  de  $0,5$  y el índice de refracción de  $1,49$  entonces este ángulo será de  $30$  grados, lo cual muestra la importancia de caracterizar el ángulo de pulido de la fibra óptica, lo cual permitirá mejorar la sensibilidad de detección de los plasmones formados. Justamente la figura (21), representa la dependencia del ángulo de incidencia ( $\theta$ ) sobre la película metálica de oro en función del ángulo de transmisión de la luz ( $\varphi$ ) en la fibra óptica, donde se observa claramente que el ángulo de pulimento ( $\beta$ ) limita los posibles ángulos de incidencia de la luz en el sensor, y como evidencia en la figura (20), estos ángulos son muy importantes para la formación de los plasmónes y en últimas el funcionamiento del sensor.

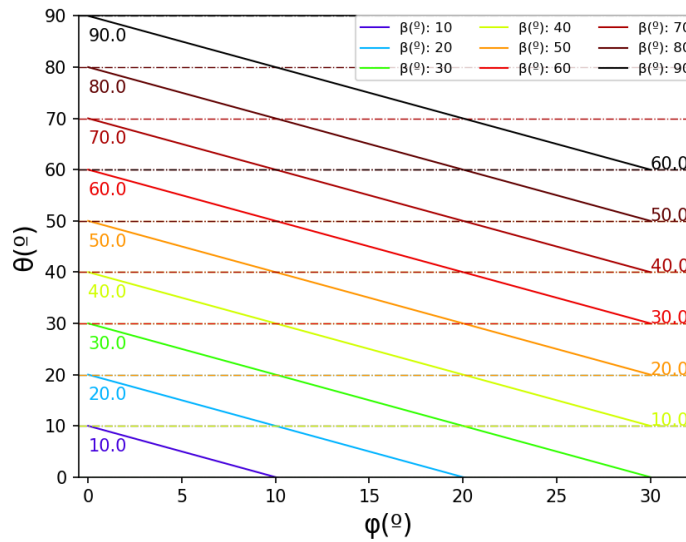


Figura 21: ángulo de incidencia( $\theta$ ) en función del ángulo de transmisión( $\varphi$ ) de la luz en la fibra, para diferentes ángulos de pulido( $\beta$ ).

## 7.6. Dependencia de la formación de los SPR en función del ángulo de incidencia y la longitud de onda sobre la película metálica

Con el objetivo de estudiar la dependencia de los picos de absorción en función tanto del ángulo de incidencia como de la longitud de onda de la luz, y tener una mejor apreciación de la importancia de estas dos características de la luz incidente en el sensor, se realizaron rutinas de programación que permiten obtener las gráficas de las figuras (22, 23, 24).

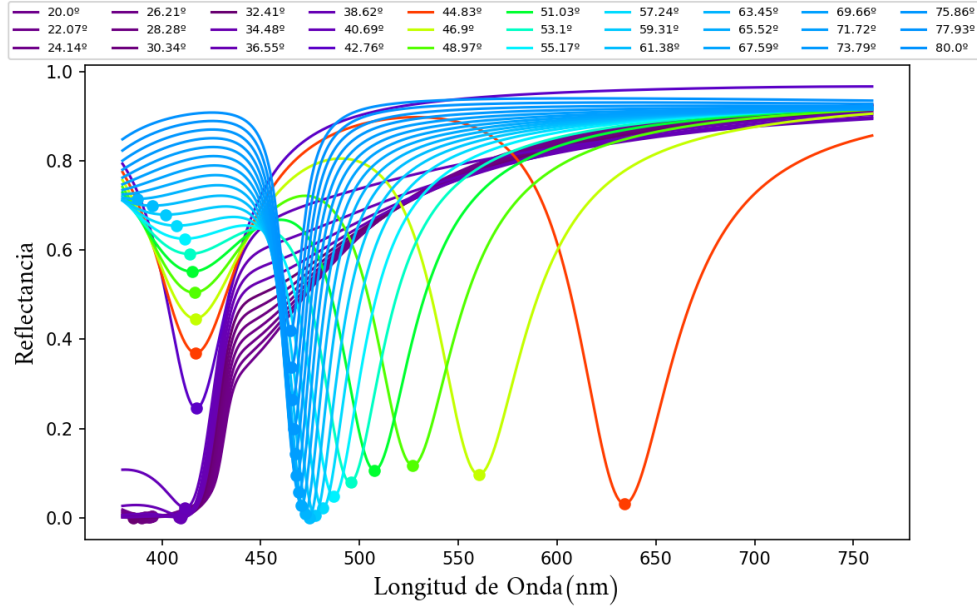


Figura 22: Reflectancia vs Longitud de onda para modos de propagación de la luz con ángulos de incidencia desde 40 a 80, para una estructura como la descrita en la figura (12), el índice de refracción del primer medio es 1.49, el espesor de la película metálica es 50 nm y el último medio es vacío.

En la figura (22) se muestra de nuevo la reflectancia en función de la longitud de onda para luz incidente en la película metálica sobre el sensor a diferentes ángulos de incidencia, en la simulación se toma como base la estructura de tres capas como la descrita en la figura (12). Se puede observar que para ángulos de incidencia de la luz desde 40 se muestra la formación de plasmónes a dos longitudes de onda distintas  $\lambda_{sp}$ , esto debido a la formación de plasmónes acoplados en ambas caras de la película metálica [14], también se evidencia que el plasmón de más baja energía es aquel que tiene mayor absorción de la energía de la onda incidente y se forman a longitudes de onda mayores a 450 nm, donde es importante destacar que la mayoría de los plasmónes formados en el sensor están comprendidos entre 450 nm a 500 nm. Los plasmónes de mayor energía se presentan para longitudes de onda menores 420 nm, donde se observa que el desplazamiento de éstos en función de la variación del ángulo de incidencia, es menos pronunciado con respecto a los plasmónes de menor energía, lo anterior puede tener como consecuencia un cambio en las propiedades del último medio, no en función del desplazamiento de la longitud de resonancia del plasmón (lo cual se logra con los plasmónes de menor energía), si no, en función de la variación de la intensidad de los mismos.

Con el objetivo de observar bajo qué ángulos de incidencia de la luz, la formación del plasmón se presenta de forma óptima<sup>30</sup>, se realiza una gráfica con los mínimos de intensidad de las curvas de la figura (22) en función de los ángulos de incidencia, donde el color correspondiente de cada dato de la gráfica representa la longitud de onda donde se debería observar la formación de los plasmónes, estos resultados se muestran en la figura (23); como se puede observar justo entre 50 y 70 se presentan los plasmónes de menor energía cuya absorción es la más significativa, de hecho, cerca a 60 se tiene el plasmón con mayor resonancia, y a medida que el ángulo de incidencia crece la intensidad de formación de los plasmónes disminuye, debido a que no se presenta la condición de resonancia. Se evidencia también que a 42,7 aparece una discontinuidad en la formación de los plasmónes, porque a estos modos de incidencia de la luz, la formación de plasmónes se da a partir de longitudes de onda por debajo a los 417,5 nm,

<sup>30</sup>La palabra óptima hace referencia a la longitud de onda y al mínimo de intensidad en la curva de reflectancia, donde se forma el plasmón con un DA considerable, para cada modo de propagación de la luz por el sensor

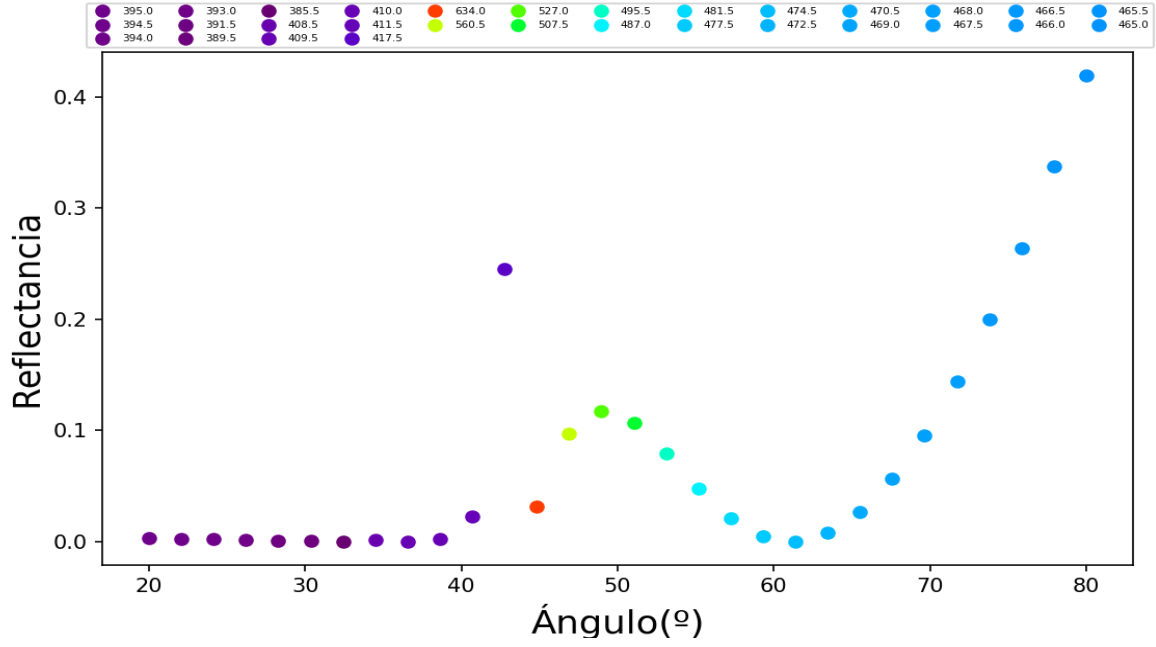


Figura 23: Reflectancia( $R$ ) en función del ángulo de resonancia ( $\theta_{sp}$ ) para modos de propagación de la luz con ángulos de incidencia desde 20 a 88, para una estructura como la descrita en la figura(12), el índice de refracción del primer medio es 1,49, el espesor de la película metálica es 50 nm y el último medio es vacío.

longitudes de onda para las cuales se forman los plasmónes de mayor energía y que su comportamiento es distinto a los plasmónes de menor energía.

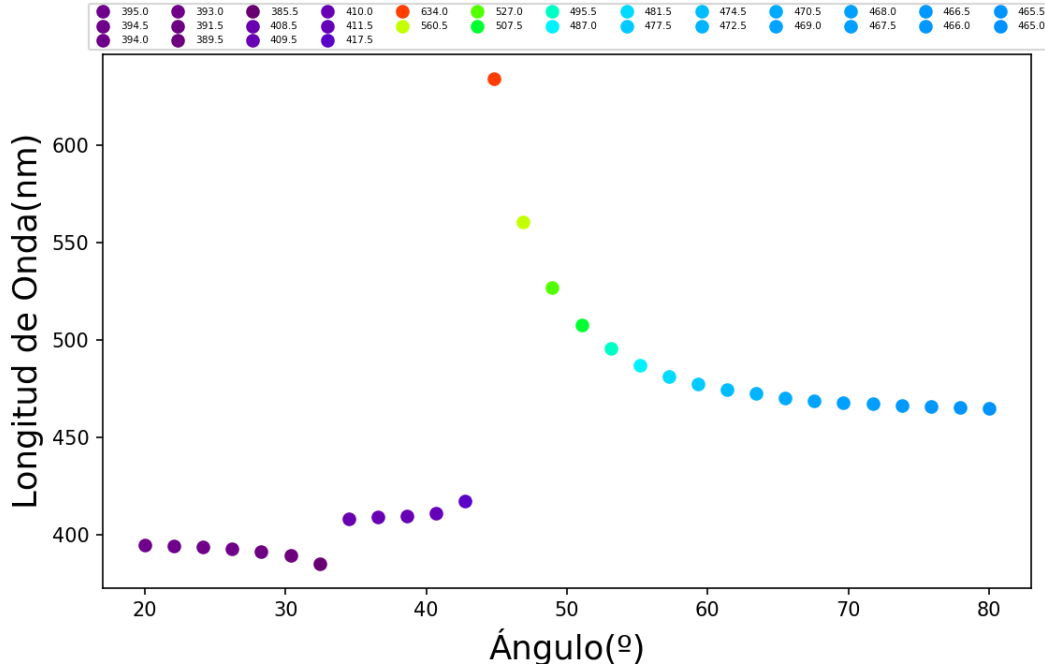
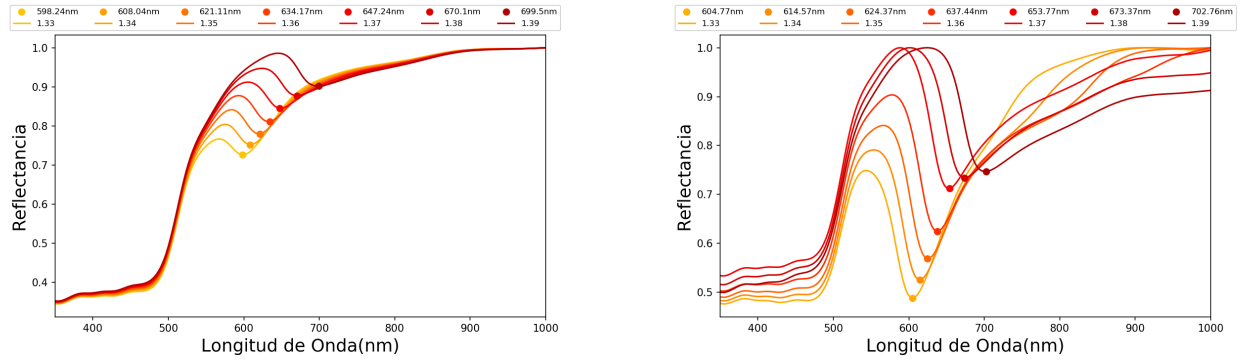


Figura 24: Longitud de Onda de resonancia( $\lambda_{sp}$ ) en función del ángulo de resonancia( $\theta_{sp}$ ), para modos de propagación de la luz con ángulos de incidencia desde 20 a 88, para una estructura como la descrita en la figura(12), el índice de refracción del primer medio es 1,49, el espesor de la película metálica es 50 nm y el último medio es vacío.

Finalmente, se realizó un gráfico de longitud de onda de resonancia en función de los ángulos de resonancia para la formación de los plasmónes, los resultados se muestran en la figura (24), donde se puede observar que para ángulos mayores a 50 se tiene la mayor formación de plasmónes por parte del sensor, los cuales se encuentran en longitudes de onda entre 450 *nm* y 500 *nm*. El color que se observa en cada uno de los puntos de la figura, corresponde a la longitud de onda que promueve la formación del plasmón a ese ángulo en específico. Podemos observar que a un ángulo menor a 45, se tiene la formación de plasmónes con mayores frecuencias, o dicho de otro modo, que presentan una mayor energía, donde se debe tener presente que la formación de los plasmones se establece bajo la formación de la onda evanescente, la cual solo se cumple para ángulos mayores al ángulo crítico de la estructura fibra-oro, y de la gráfica (15a) se observa que para longitudes de onda menores a los 381*nm*, el índice de refracción del metal es igual o mayor que el índice de refracción de la fibra, con lo cual la formación de estos plasmones de mayor energía, no se podría satisfacer con la estructura específica del sensor propuesto en la figura (12), esta es la razón por la cual la figura(20a) no muestra el pico característico de absorción debido a la formación de algún plasmón, donde se puede observar de la figura(15b), que el ángulo crítico para los 381*nm* es de aproximadamente 40. También se observa de la figura (24) que para ángulos entre 45 y 50, las longitudes de onda que excitarían el plasmón se presentan para fuentes de luz con una longitud de onda desde los 500 *nm* hasta los 650 *nm*, donde estos plasmones presentarían una menor frecuencia de resonancia o energía. La importancia de esta última gráfica radica en permitir observar la dependencia de los ángulos a los cuales debe incidir la luz con una longitud de onda respectiva, para obtener una mejor respuesta del sensor.

## 7.7. Estudio de la reflectancia en función de la longitud de onda, con la variación del índice de refracción de la última capa del sensor

Al considerar modos de propagación de la luz dentro de la fibra óptica que inciden sobre la película metálica con una polarización TM y ángulos entre 20 y 50 (ver figura 12), manteniendo presentes que para estos ángulos la formación de plasmónes es prácticamente nula (ver figura 20a) debido a que no es posible la formación de una onda evanescente, promotora de los SPR para todo el rango de longitudes de onda, por lo tanto, la elección del ángulo de pulido  $\beta$  es esencial para favorecer en mayor medida ángulos de incidencia de la luz en la capa metálica por encima de 40, de la figura (21) se observa que este ángulo de pulimento debe ser mayor a 40. Al graficar la luz reflejada en la interfaz dieléctrico-oro del sensor, cuando se tienen modos de propagación entre 40 y 85, para longitudes de onda desde los 380 nm hasta los 800 nm, se obtienen las curvas mostradas en la figura (25), donde se destaca la formación de los plasmónes a partir de los 500 nm a los 800 nm; es pertinente mencionar que los mínimos de las curvas están asociados a la formación de los plasmones de menor energía con la mayor absorción, debido a que justamente el resultado de la figura (24) muestra que solo estos plasmones se formaran, para el rango de longitudes de onda antes mencionado. En la figura (25b), se han considerado menos modos<sup>31</sup> de propagación, lo cual muestra un mayor  $DA$  para los plasmones formados, en principio este control solo es posible con un control del ángulo de pulido de la fibra óptica.



(a) Modos de propagación con ángulos de incidencia desde 50 – 85

(b) Modos de propagación con ángulos de incidencia desde 70 – 85

Figura 25: Reflectancia en función de la longitud de onda para modos de propagación con ángulos de incidencia en el sensor desde 50 – 85, cuando se variaba el índice de refracción del último medio desde 1,33 a 1,38, los parámetros de la simulación fueron los siguientes: el sensor a modelar estaba compuesto por tres capas (dieléctrico-película metálica-agua) y el espesor de la película metálica fue de 50 nm.

Se observa, que al cambiar el índice de refracción del medio en valores cada vez más grandes, las respectivas longitudes de resonancia se desplazan a mayores valores, comportamiento que concuerda con la relación (49), este corrimiento es importante para utilizar el fenómeno de SPR como mecanismo de sensado. Los sensores basados en el SPR se han utilizado para la detección de compuestos químicos en los medios acuosos [1, 2, 16], la variación del índice de refracción cerca a la superficie del metal cambia las propiedades ópticas del medio en esta región, esta variación se puede lograr, ligando las moléculas a monitorear con otras moléculas denominadas analito [7, 9], y en este proceso el vector de onda asociado al plasmón, se desplazará debido a la dependencia tanto del vector de onda de la luz incidente (ver ecuación 49), como del índice de refracción de los medios involucrados en el sistema.

Una vez que se tiene claro el rango apropiado de ángulos de incidencia de la luz para la formación de los plasmónes (ver figura 25b), entonces, se realiza una rutina de programa con el fin de observar el efecto que tiene considerar este rango de ángulos, estos resultados se muestran en la figura (26). Al variar el índice de refracción del agua en una milésima parte, más específicamente desde 1,322 hasta 1,334<sup>32</sup>, vemos claramente como se desplaza la formación del plasmón a mayores longitudes de onda. Por consiguiente, es posible diseñar el sensor de tal forma,

<sup>31</sup> Estrictamente la palabra modo representa una posible solución admisible para los campos eléctricos y magnéticos en un sistema determinado, en este contexto se utiliza para especificar un camino seguido por un haz de luz, con una longitud de onda determinada.

<sup>32</sup> Este rango se toma con base a un estudio realizado en el (2008) con el fin de medir la variación en el índice de refracción del agua usando un interferómetro de (Fabry-Perot) el cual se construye a partir una fibra óptica [34]

que en una mayor medida los modos de propagación permitan detectar variaciones de 0,001 en el índice de refracción.

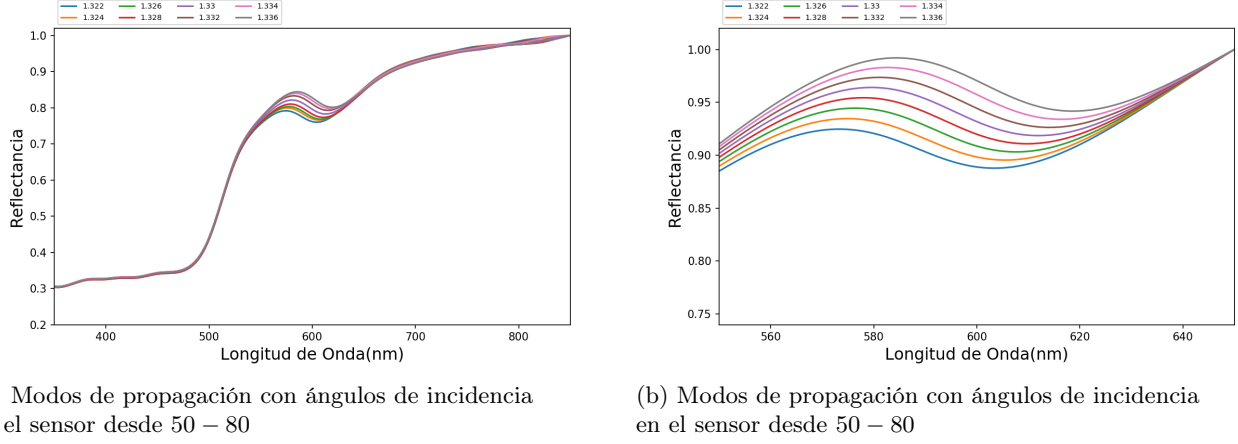


Figura 26: Reflectancia en función de la longitud de onda para modos de propagación con ángulos de incidencia en el sensor desde 50 – 80, cuando se variaba el índice de refracción del último medio desde 1,322 a 1,334, los parámetros de la simulación fueron los siguientes: el sensor a modelar estaba compuesto por tres capas (dieléctrico-película metálica-agua) y el espesor de la película metálica fue 50 *nm*.

Adicionalmente, se puede observar en la figura (26) el corrimiento de los picos de absorción entre 500 *nm* a 700 *nm*, este corrimiento se espera, ya que la resolución del sensor estará determinada por este desplazamiento en la longitud de onda, de esta manera, la sensibilidad  $S$  del sensor, se puede definir en términos del cambio de la longitud de resonancia ( $\Delta\lambda_{res}$ ) sobre la variación del índice de refracción ( $\Delta RI$ ) del último medio, la cual se mide en RIU (Refractive Units Index)<sup>33</sup> [10]. Por lo tanto, la resolución para el sensor en función de la variación con el índice de refracción del último medio, estará determinado por:

$$S = \frac{\Delta\lambda_{res}}{\Delta RI} nm * RIU^{-1} \quad (87)$$

<sup>33</sup>Un RIU(Refractive Units Index): Es utilizado como unidad adimensional para medir el mínimo cambio detectable en el índice de refracción de un medio, esta unidad es comúnmente utilizada cuando se tiene sensores que se basan en la formación de una onda evanescente entre los medios que componen el mismo.

## 7.8. Inclusión de la capa de nanopartículas de oro al sensor

De trabajos previos se conoce que el metilmercurio tiene una afinidad química con el oro, es por esta razón que este metal se ha empleado para detección de este compuesto en soluciones acuosas, mostrando buena reproducibilidad y alta sensibilidad [6]. Con el objetivo de estudiar la influencia de la deposición de las nanopartículas (NPs) de oro sobre la película metálica del sensor (ver figura 12), y de esta manera determinar el efecto en el proceso de sensado, en una primera aproximación se considerará a las nanopartículas de oro con una geometría esférica y como una capa adicional al sensor, donde la deposición de estas sobre la película de oro se considerará uniforme, despreciando los efectos de interacción entre estas NPs y también la estructura periódica que se puede formar con estas NPs; para incluir esta capa adicional en el modelo y utilizar el MMT, se debe conocer experimentalmente o modelar teóricamente la permitividad eléctrica de las nanopartículas de oro. El comportamiento óptico de las nanopartículas de oro es diferente al de una muestra macroscópica del mismo [17, 35], por lo tanto, se usará el siguiente modelo para describir el comportamiento de las mismas [23]:

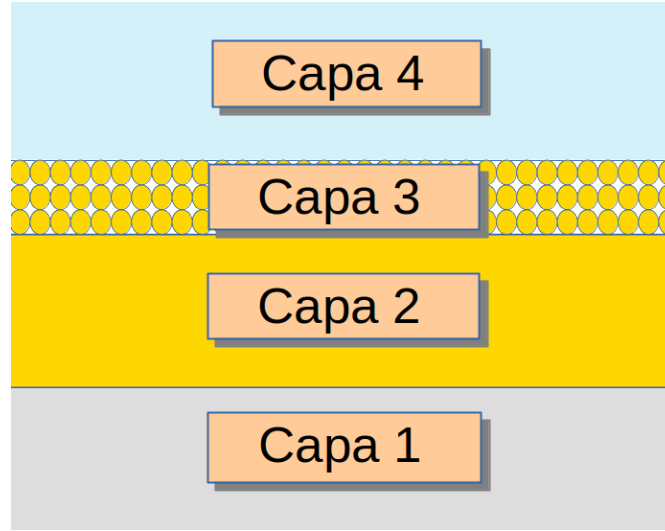


Figura 27: Representación gráfica de los medios que componen el sensor: medio 1 es el dieléctrico por el cual se propagará la luz que excitará el sensor, medio 2 es la película de oro, el medio 3 es la capa de las nanopartículas de oro y por último el medio 4 representa la última capa del sensor, esto es el medio semi-infinito.

$$\epsilon^{(Au)}(\omega, R) = \epsilon_{Di}(\omega, R) + i\Delta\epsilon^{(Au)}(\omega) \quad (88)$$

En la relación(88),  $\epsilon^{(Au)}(\omega, R)$  representan la permitividad dieléctrica de las nanopartículas de oro, en las cuales se tiene en cuenta tanto el tamaño de las mismas, la forma y las transiciones electrónicas de las bandas de energía para los átomos de oro dependientes de la frecuencia de la radiación incidente.

El término de la permitividad dieléctrica de las NPs  $\epsilon_{Di}(\omega, R)$  está dado por:

$$\epsilon_{Di}(\omega, R) = \epsilon_0 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i(\gamma_{bulk} + C\frac{v_F}{R})\omega} \quad (89)$$

Donde  $v_F$  representa la velocidad de Fermi para los electrones de conducción del metal, y  $R$  el radio de las NPs de oro.

En esta relación (Ec.89) se considera el tamaño de las nanopartículas, porque, al ser este comparable o más pequeño que el recorrido libre medio de los electrones del metal, el comportamiento de la permitividad dieléctrica es muy diferente al de la muestra macroscópica [35]<sup>34</sup>, lo cual se puede entender cuando se considera el tiempo entre colisiones de los electrones con los núcleos de los átomos del metal, ya que, este tiempo disminuye para radios de las nanopartículas muy pequeños, y por lo tanto, la frecuencia de colisión( $\gamma_{bulk}$ ) aumentará; se puede observar que el término  $v_F/R$  da cuenta del efecto de estas colisiones con los núcleos de los átomos del metal,

<sup>34</sup>Ver sección del Marco Teórico

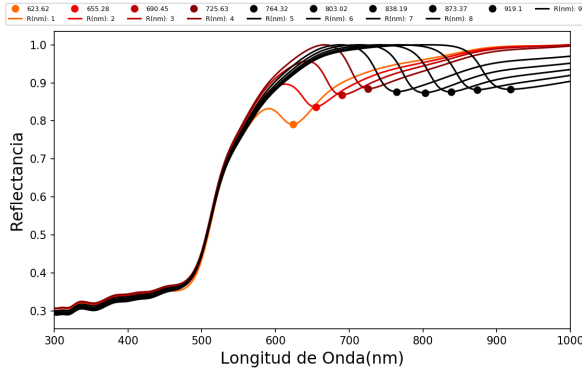
lo que significa que para tamaños de las nanopartículas más pequeños que el recorrido libre medio, el tiempo de colisión disminuirá haciendo que  $v_F/R$  sea despreciable. La cantidad  $C$  se incluye para ajustar los datos experimentales para la permitividad dieléctrica de las nanopartículas de oro, el valor aceptado para estas es de 0,33 [20,36].

El término  $\Delta\epsilon^{(Au)}(\omega)$  determina la contribución de las transiciones electrónicas del oro, donde esta contribución depende de la frecuencia de la radiación incidente y están determinadas por la configuración electrónica de los átomos del mismo:

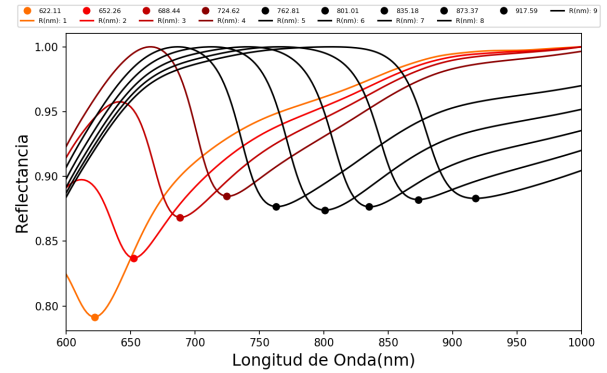
$$\Delta\epsilon^{(Au)}(\omega) = \frac{A}{1 + e^{-(\omega - \omega_C)/\Delta}} \quad (90)$$

Donde  $A$ ,  $\omega_C$  y  $\Delta$  son parámetros de ajuste en el modelo, que dependen de los datos experimentales para el metal en específico que se desea utilizar, por ejemplo, para el oro se tiene los siguientes valores: 5,6, 2,4eV y 0,17eV respectivamente [23].

Inicialmente, se realizó una rutina de programa para ver el efecto del tamaño de las nanopartículas de oro, donde se cambió el radio de las mismas desde 2 nm hasta 28 nm, los resultados se muestran en la figura (28), en este programa el índice de refracción del primer medio (fibra óptica) fue de (1,49), el espesor de la película delgada fue de 50 nm y el último medio (Capa 4) está representado por el agua a 24°C, con un índice de refracción de 1,33; en la simulación se consideran modos de propagación por la fibra óptica con ángulos de incidencia sobre la película metálica del sensor, desde los 45 hasta 85.



(a) Reflectancia vs longitud de onda en un rango de 300 nm hasta 1000 nm

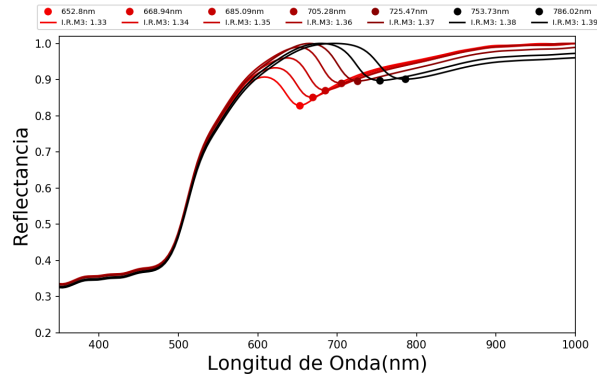


(b) Imagen ampliada de la figura(28a)

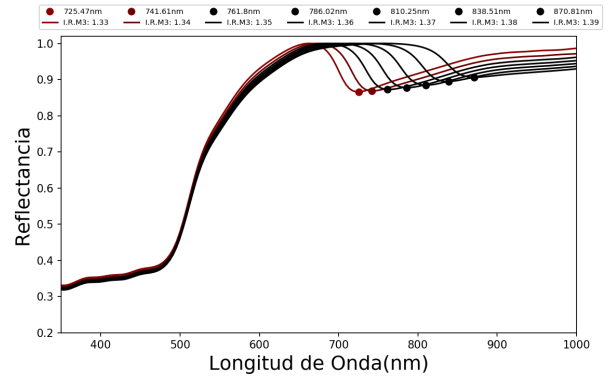
Figura 28: Reflectancia en función de la longitud de onda, el sensor a modelar estaba compuesto por 4 capas las cuales fueron (Dieléctrico-Película Metálica-Nanopartículas de Oro-Agua) donde el espesor de la película metálica fue de 50 nm y el índice de refracción del agua fue 1,33

Como se observa, al aumentar el tamaño de las nanopartículas, los picos de absorción debido a la formación de los plasmones se desplazan a longitudes de onda más grandes, esto es, desde  $R = 1$  nm hasta  $R = 14$  nm. Con la idea de excitar los plasmones en el espectro visible, el valor ideal de  $R$  debería estar entre (1 nm – 3 nm), lo cual se infiere de la figura 28. Razón por la cual, se procede a realizar una simulación en donde se estudie el efecto que tiene el cambio del radio de las nanopartículas de oro, en la detección de las variaciones en el índice de refracción del último medio (capa 4), para ello, se realizó un programa donde este medio se caracterizó con un IR desde 1,33 hasta 1,38, las características de la simulación son las mismas que las del anterior programa, pero, con la adición de la variación de este índice. Los resultados de esta simulación se presentan en la figura (29).

De la figura(29) se puede destacar el color de cada curva, el cual corresponde a la longitud de onda donde aparecen mínimos de absorción, característicos de la formación de los plasmones. También se evidencia que al variar el índice de refracción del último medio, el punto donde aparece el plasmón de mayor intensidad, tiene un desplazamiento hacia longitudes de onda más grandes, esto es, hacia el infrarrojo, lo anterior es claro cuando el radio de las nanopartículas de oro es de  $R = 2$  nm y  $R = 4$  nm, figuras (29a y 29b). También se aprecia que al tener el radio de las nanopartículas de oro valores mayores a 4 nm, entonces la formación de los plasmones de mayor intensidad estarán fuera del espectro visible. Si el sensor se diseña de tal forma que trabaje en el espectro visible, esto último no sería lo más adecuado. Por lo anterior, debemos resaltar que radio las nanopartículas debe ser menor a 4 nm.



(a) Para un radio de nanopartículas de oro de  $R = 2nm$



(b) Para un radio de nanopartículas de oro de  $R = 4nm$

Figura 29: Reflectancia en función de la longitud de onda, el sensor a modelar estaba compuesto por 4 capas las cuales fueron (Dieléctrico-Película Metálica-Nanopartículas de Oro-Agua) donde el espesor de la película metálica fue de  $50 nm$  y el índice de refracción del agua se varió desde 1,33 hasta 1,38

De este estudio, en primera instancia, las nanopartículas de oro se han tratado como una capa más para el sensor, pero al tener en cuenta que estas pueden interactuar con el metilmercurio, entonces se debe modelar dicha interacción, puesto que uno de los efectos de la interacción del oro con el mercurio es el cambio del tamaño de las nanopartículas [6, 17, 35], lo que generaría un corrimiento de los picos donde aparecen los plasmónes.

## 8. Conclusiones

- El método de la matriz de transferencia (MMT) ([29]), permite determinar los coeficientes de Fresnel en cada capa del sensor; en esta investigación se utilizó una rutina en python existente [37], que permitió estudiar diferentes propiedades ópticas de los medios por donde se propaga la luz. Se utilizó el MMT, hallando que a la longitud de onda de la luz igual a  $633\text{ nm}$ , el oro muestra la formación de un plasmón de máxima intensidad en un ángulo de  $44,13^\circ$ .
- Se evidenció que la respuesta electrónica en la capa de oro puede ser descrita por el modelo de Lorentz-Drude [23] para valores de energía por debajo de  $1,8\text{ eV}$ , donde los datos experimentales coinciden con este modelo; con las simulaciones realizadas, se encuentra, que la respuesta plasmónica del oro sucede en mayor medida en el espectro visible, esto es, de  $1,4\text{ eV}$  a  $4,1\text{ eV}$ , razón por la cual, se hace necesario el uso de un modelo que permita determinar, el valor de la respuesta dieléctrica del oro en este rango de longitudes de onda. Una posible solución, utilizada en esta investigación, es considerar una interpolación de los resultados experimentales reportados en la literatura, para determinar un valor aproximado de la misma [27].
- De las diferentes rutinas utilizadas para las simulaciones, se estudiaron los diferentes parámetros de funcionamiento del transductor de plasmones ópticos, a continuación resumimos los más importantes:
  1. El espesor de la película metálica, que tiene influencia en la intensidad con la que se forman los SPR, y en última instancia la capacidad de acoplar los plasmones formados en ambos lados de la superficie de la película metálica, lo cual es esencial si se desea detectar algún cambio del índice de refracción del medio de sensado. De los resultados de las rutinas de programa realizadas, encontramos un rango de espesor óptimo para el oro de  $(50 - 60)\text{ nm}$ , rango en el cual, la intensidad de los plasmones es significativa para diferentes longitudes de onda (ver figuras ?? y 17).
  2. El ángulo de incidencia de la luz con la capa de oro del sensor, quien está relacionado con el modo de propagación de la luz por la fibra óptica, y que finalmente nos da una idea de la respuesta del sensor. Los modos que presentan mejor respuesta a la formación de los plasmones, están en el rango de  $50$  a  $70^\circ$  (ver figura 24), donde es importante mencionar, la dependencia de estos con el índice de refracción de los medios que conforman el sensor (ver figura 19), en especial el de la última capa (ver figuras 25 y 26).
  3. El índice de refracción del primer medio del sensor, a pesar de que no tiene influencia en la intensidad con la que se forman los plasmones, si se observó un desplazamiento de los picos de formación del plasmón al variar este índice, comportamiento que coincide con lo esperado de la relación de dispersión (Ec.49).
- La forma en que la luz se propaga por la fibra óptica influye en la formación de los plasmones, se encontró que la formación óptima de estos se da para ángulos de incidencia  $\theta$  mayores a  $52^\circ$ , y las longitudes de onda de la luz incidente abarcan desde los  $450\text{ nm}$  hasta los  $500\text{ nm}$ , donde se determina también que para ángulos más pequeños, las longitudes de onda de la luz incidente que muestran una formación adecuada de plasmones, se encuentran desde los  $500\text{ nm}$  en adelante (ver figura ??).
- Se encontró al variar el índice de refracción de la última capa del sensor (la cual fue modelada como agua), que la longitud de onda donde se forma el plasmón, era mayor a medida que aumentaba el índice de refracción; también se encuentra que las longitudes de onda donde se formaban los plasmones están comprendidas entre  $600\text{ nm}$  a  $700\text{ nm}$  aproximadamente (ver figura 25), por lo tanto, la fuente de luz utilizada para excitar los plasmones es muy importante, y el espectro de emisión de la misma debe estar centrado cerca de estas longitudes de onda ( $\lambda_{sp}$ ), lo que permitiría un buen funcionamiento del sensor.
- La respuesta del sensor se ve influenciada por las características espaciales y temporales de la luz que incide en el mismo, así como de la respuesta dieléctrica de las capas que componen el sensor, por ejemplo, se encuentra que este responde mejor a ciertas longitudes de onda, las cuales van desde los  $550\text{ nm}$  a los  $750\text{ nm}$ , cuando el último medio es agua (ver figura 26).
- Se realizó la inclusión de las nanopartículas en el modelo a estudiar, al tratar estas en una primera aproximación como una capa adicional sobre la película metálica de oro (capa 2); se encontró, que al aumentar el radio de las mismas, la longitud de onda donde se forma el plasmón se desplaza a valores más grandes (ver figuras 28),

lo cual es de gran utilidad en términos del sensado de metales pesados en agua, como puede ser el caso del metilmercurio ( $[CH_3Hg]^+$ ), ya que se conoce que el mercurio presenta una afinidad electrónica con el oro [6].

## 9. Prospectivas

Entre los futuros desarrollos de esta línea de investigación, cabe plantear el análisis de la especularidad de la superficie de pulido sobre la fibra óptica, en la respuesta y sensibilidad del sensor a modelar, donde también se investigue, el efecto en el área de pulido en la formación de los plasmones; también se plantea estudiar la influencia de la curvatura de la fibra óptica en la sensibilidad del sensor, donde se encuentre un modelo que relacione la formación de los mismos con el radio de curvatura de la fibra. También, se deja abierta la posibilidad de aplicar la metodología planteada en este trabajo, para estudiar la formación de los plasmones cuando se tienen cambios en la temperatura, así como el efecto del índice de refracción de los medios que conforman la región de sensado y la última capa del sensor. Finalmente, se plantea la posibilidad de mejora en el modelo de interacción de las nanopartículas de oro con las moléculas a monitorear, y por lo tanto, que incluya el efecto de esta interacción en la formación de los plasmones.

## 10. Anexos

### 10.1. Ecuaciones de Hemholtz

Aplicaremos las ecuaciones de Maxwell(ver relación 91) cuando una onda se propaga por un medio material como el de la figura(5):

$$\begin{aligned} (I) \quad \nabla \cdot \vec{D} &= \rho_{ext} & (III) \quad \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ (II) \quad \nabla \cdot \vec{B} &= 0 & (IV) \quad \nabla \times \vec{H} &= \vec{J}_{ext} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \end{aligned} \quad (91)$$

Donde  $\vec{D}$  es el vector de desplazamiento eléctrico,  $\vec{B}$  el vector de inducción magnética y  $\vec{J}$  el vector de densidad de corriente, los cuales en un medio homogéneo e isotrópico toman la forma:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (92)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (93)$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (94)$$

Siendo  $\epsilon$  la función dieléctrica del medio en el cual se propaga la onda, donde se asupuesto que es un medio con una permeabilidad magnética igual a la del vacío, esto es un medio no magnético.

Para las deducciones se supondrá un sistema de referencia en el plano ( $z - x$ ). Si no existe una carga externa y ninguna densidad de carga libre dentro de sistema, entonces:

$$\rho_{ext} = 0 \quad (95)$$

$$\vec{J}_{ext} = 0 \quad (96)$$

Con lo cual de la ley de inducción de Faraday:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} \quad (97)$$

Pero se debe tener presente que

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} \quad (98)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \vec{E} \cdot \nabla \epsilon(\vec{r}) + \epsilon \nabla \cdot \vec{E} \quad (99)$$

Si no hay ningún campo eléctrico externo afectando el sistema, entonces se debe cumplir que  $\nabla \cdot \vec{D} = 0$ , con lo cual se obtiene:

$$\nabla \cdot \vec{E} = -\frac{1}{\epsilon} \vec{E} \cdot \nabla \epsilon \quad (100)$$

Por lo tanto (97) queda como:

$$-\nabla \left( \frac{1}{\epsilon} \vec{E} \cdot \nabla \epsilon \right) - \nabla^2 \vec{E} = -\mu_0 \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (101)$$

Donde se debe tener presente la dependencia de  $\epsilon = \epsilon(\vec{r})$  con el radio vector de posición  $\vec{r}$ . Para el rango óptico la variación de  $\epsilon$  con la posición es despreciable, con lo cual:

$$\nabla \cdot \epsilon(\vec{r}) = 0 \quad (102)$$

De donde obtenemos finalmente:

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (103)$$

La expresión(103) representa la ecuación para la propagación de ondas en un medio material. Para resolver la ecuación(103) asumimos una dependencia armónica en el tiempo para los campos  $\vec{E}$  y  $\vec{H}$ , por lo cual:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (104)$$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (105)$$

Donde:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (106)$$

$$\vec{H}(\vec{r}) = \vec{H}_0 e^{\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (107)$$

Donde  $k_0 = \frac{\omega}{c}$  el vector de onda, para una onda que se propaga en el vacío, y teniendo en cuenta la dependencia para los campos con la parte temporal, entonces  $\frac{\partial}{\partial t} = -i\omega$ , con lo cual de la ecuación(103) obtenemos:

$$\nabla^2 \vec{E} + k_0^2 \epsilon \vec{E} = 0 \quad (108)$$

Similarmente, se puede deducir una ecuación para el campo magnético  $\vec{H}$ . La ecuación (108) representa la solución a la ecuación de una onda que se propaga en un medio dispersivo con una función dieléctrica real, que no presenta una variación espacial, esta ecuación se denomina la ecuación de Helmholtz y es central en el estudio de guías de ondas [25, 26].

Para resolver las soluciones a la ecuación(108) se supondrá lo siguiente:

- Se tendrá un problema 1D con el sistema de referencia en el plano  $z - x$ , como el de la figura(5).
- La onda se propaga solo en la dirección  $x$ .
- La función dieléctrica del material  $\epsilon(\vec{r})$ , solo depende de las coordenadas espaciales
- El sistema es homogéneo en  $x, y$ , con lo cual  $\epsilon$  dependerá espacialmente de  $z$ .

Armado con las anteriores condiciones y teniendo en cuenta que:

$$\vec{E}(x, y, z) = \vec{E}(z) e^{i\beta x} \quad (109)$$

$$\vec{k} = \beta x \quad (110)$$

Con lo cual se obtiene entonces:

$$\nabla^2 \vec{E} = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \vec{E}(z) e^{i\beta x} \quad (111)$$

$$= \left( \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial z^2} - \beta^2 \vec{E}(z) \right) e^{i\beta x} \quad (112)$$

Donde se obtiene finalmente de la relación(108) se obtiene:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon - \beta^2) \vec{E}(z) = 0 \quad (113)$$

Similarmente, para el campo H se tendrá una relación semejante.

## 10.2. Deducción de la relación de dispersión para los plasmones

En esta sección se obtendrá la relación de dispersión para la formación de los plasmones, en el caso de que se tenga una estructura como la representada en la figura(5) a partir de las ecuaciones de Maxwell(91), considerando una solución armónicas dependientes del tiempo ( $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega$ ) y expandiendo (91) se obtiene:

De III en (91).

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu_0 H_x \quad (114)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu_0 H_y \quad (115)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_z \quad (116)$$

De IV en (91).

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_x \quad (117)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_y \quad (118)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_z \quad (119)$$

Considerando una onda que se propaga en la dirección x, y el medio es homogéneo en y, se tendrá entonces:

$$\frac{\partial}{\partial x} = i\beta \implies \text{cambio en } x \quad (120)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = 0 \implies \text{homogenidad en } y \quad (121)$$

De las ecuaciones en(114 y 117) se tiene entonces:

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x \quad (122)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega\mu_0 H_y \quad (123)$$

$$i\beta E_y = i\omega\mu_0 H_z \quad (124)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\epsilon_0 \epsilon E_x \quad (125)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_y \quad (126)$$

$$i\beta H_y = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_z \quad (127)$$

El sistema de ecuaciones en (122) admite dos tipos de soluciones, las cuales corresponde a la polarización de la onda electromagnética(ver figura 6):

$$(TM \text{ o } p) \implies (E_x, E_z, H_y) \quad (128)$$

$$(TE \text{ o } s) \implies (H_x, H_z, E_y) \quad (129)$$

Considerando modos (TM), de las ecuaciones(122) se obtiene:

$$E_x = -i \frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (130)$$

$$E_z = -\frac{\beta}{\omega \epsilon_0 \epsilon} H_y \quad (131)$$

De donde se obtiene:

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon - \beta^2) H_y = 0 \quad (132)$$

Similarmente para los modos (TE), de las ecuaciones(122) se obtiene:

$$H_x = i \frac{1}{\omega \mu_0 \epsilon} \frac{\partial E_y}{\partial z} \quad (133)$$

$$H_z = \frac{\beta}{\omega \mu_0 \epsilon} E_y \quad (134)$$

De donde se obtiene:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon - \beta^2) E_y = 0 \quad (135)$$

Suponiendo una estructura como la de la figura(5), donde el índice de refracción para el sistema completo tiene la siguiente forma:

$$n(z) = \begin{cases} n_d & \text{if } z > 0 \\ n_m & \text{if } z \leq 0 \end{cases} \quad (136)$$

donde  $n_d$  es el índice de refracción del dieléctrico y  $n_m$  es el índice de refracción del metal, cuál está dado por (148).

Considerando que se desea buscar soluciones, en las cuales los campos en la interfase de los medios están confinados en  $z = 0$  y se propagan en  $x$ , entonces el caso de modos (TM) se tendrá:

Para  $z > 0$  :

$$\begin{aligned} H_y(z) &= H_2 e^{i\beta * x} e^{-k_2 * z} \\ E_x(z) &= \frac{i H_2 k_2}{\omega \epsilon_0 \epsilon_2} e^{i\beta * x} e^{-k_2 * z} \\ E_z(z) &= \frac{-H_2 \beta}{\omega \epsilon_0 \epsilon_2} e^{i\beta * x} e^{-k_2 * z} \end{aligned} \quad (137)$$

Para  $z < 0$

$$\begin{aligned} H_y(z) &= H_1 e^{i\beta * x} e^{k_1 * z} \\ E_x(z) &= \frac{-i H_1 k_1}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} e^{i\beta * x} e^{k_1 * z} \\ E_z(z) &= \frac{-H_1 \beta}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} e^{i\beta * x} e^{k_1 * z} \end{aligned} \quad (138)$$

Se llega a estas ecuaciones a partir de las ecuaciones de Maxwell, en este caso de la divergencia y rotacional tanto de  $\vec{E}$  como  $\vec{B}$ , y del tipo de polarización considerado para las ondas que se propagan en la frontera. Debido a las condiciones de continuidad que deben cumplir los campos electromagnéticos [25] se tendrá que:

$$H_1 = H_2 \quad y \quad \frac{k_2}{k_1} = -\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \quad (139)$$

Por lo tanto se observa que al producirse un plasmón superficial, los medios deben cumplir con:

$$\begin{aligned} Re[\epsilon_1] &< 0 \\ \epsilon_2 &> 0 \end{aligned} \quad (140)$$

La onda superficial así producida solo existe entre las interfaces, y se debe producir un cambio de signo en las permitividades para que esto suceda. Como resultado de ello se puede escribir el campo magnético:

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon - \beta^2) H_y = 0 \quad (141)$$

Donde las componentes de los vectores de onda  $k_1$  y  $k_2$  deben cumplir con:

$$\begin{aligned} k_1^2 &= \beta^2 - k_0^2 \epsilon_1 \\ k_2^2 &= \beta^2 - k_0^2 \epsilon_2 \end{aligned} \quad (142)$$

De lo cual se deduce una la relación de dispersión para los plasmones:

$$\beta = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \quad \beta = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\frac{n_1^2 n_2^2}{n_1^2 + n_2^2}} \quad (143)$$

En el caso que consideremos modos de propagación (TE), se tendrá:  
Para  $z > 0$  :

$$\begin{aligned} E_y(z) &= E_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \\ H_x(z) &= -\frac{iE_2 k_2}{\omega \mu_0} e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \\ H_z(z) &= \frac{E_2 \beta}{\omega \mu_0} e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \end{aligned} \quad (144)$$

Para  $z < 0$

$$\begin{aligned} E_y(z) &= E_1 e^{i\beta x} e^{k_1 z} \\ H_x(z) &= \frac{iE_1 k_1}{\omega \mu_0} e^{i\beta x} e^{k_1 z} \\ H_z(z) &= \frac{E_1 \beta}{\omega \mu_0} e^{i\beta x} e^{k_1 z} \end{aligned} \quad (145)$$

Debido a las condiciones de continuidad que deben cumplir los campos electromagnéticos [25] se tendrá que:

$$E_1 (k_1 + k_2) = 0 \quad (146)$$

Como las ondas que se propaguen por la interfaz deben estar confinadas  $Re[k_1] > 0$  y  $Re[k_2] > 0$  entonces se llega  $A_1 = 0$  y por lo tanto  $A_2 = A_1 = 0$ , esto tiene como consecuencia que para los modos TE no exista la formación de plasmón alguno.

### 10.3. Cálculo del índice de refracción para los metales

Sabemos que la función dieléctrica para los metales tendrá la forma(ver ecuación 30):

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega) \quad (147)$$

Donde  $\epsilon_1$  esta asociada con el comportamiento óptico del metal y  $\epsilon_2$  esta relacionada con el comportamiento eléctrico del mismo. Al ser  $\epsilon(\omega)$  el indice de refracción tambien lo es ya que  $\tilde{n}(\omega) = \sqrt{\tilde{n}(\omega)}$ , esto es:

$$\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega) \quad (148)$$

Donde  $n(\omega)$  represente el índice de refracción del metal y  $\kappa(\omega)$  represente el coeficiente de extinción, el cual determina la absorción óptica del metal, cuando una onda electromagnética se propaga a través del mismo.

Usando las relaciones para  $\tilde{n}$  esto es (148), tendremos:

$$(n + i\kappa)^2 = \epsilon \quad (149)$$

$$= \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (150)$$

$$(n + i\kappa)^2 = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (151)$$

Con lo cual:

$$n^2 + 2in\kappa - \kappa^2 = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (152)$$

$$n^2 - \kappa^2 + i2n\kappa = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (153)$$

Con lo cual se deduce:

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \quad (154)$$

$$\epsilon_2 = 2n\kappa \quad (155)$$

De las relaciones en (154) podemos establecer que:

$$n^2 = \epsilon_1 + \kappa^2 \quad (156)$$

$$= \epsilon_1 + \frac{\epsilon_2^2}{4n^2} \quad (157)$$

De la ecuaciones (154) obtenemos:

$$4n^2 = 4n^2\epsilon_1 + \epsilon_2 \quad (158)$$

$$4n^2 - 4n^2\epsilon_1 - \epsilon_2 = 0 \quad (159)$$

$$n^2 - n^2\epsilon_1 - \frac{\epsilon_2}{4} = 0 \quad (160)$$

$$(161)$$

Realizando la sustitución  $x = n^2$ , para las expresiones en (158) tendríamos:

$$x^2 - \epsilon_1 x - \frac{\epsilon_2^2}{4} = 0 \quad (162)$$

$$\left(x - \frac{\epsilon_1}{2}\right)^2 = \frac{1}{4}(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2) \quad (163)$$

Donde finalmente obtenemos:

$$n^2 = \frac{\epsilon_1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (164)$$

#### 10.4. Ángulos de incidencia en la película metálica

De la figura(12) para la geometría del sensor se tiene lo siguiente: cuando la luz ingresa en la fibra óptica, con base en la ley de Snell(5) se llega a:

$$n_0 \text{sen}(\sigma) = n_n \text{sen}(\varphi) \quad (165)$$

Donde  $n_0$  es el índice de refracción del medio donde inicialmente se propaga la luz antes de ingresar a la fibra óptica y  $n_n$  representa el índice de refracción del núcleo de la fibra óptica. Del conjunto de triángulos formados en la figura(12-c) se tiene las siguientes relaciones:

$$\chi_3 + \theta = 90 \quad (166)$$

$$\chi_1 + \varphi + \theta = 180 \quad (167)$$

$$\beta + \chi_2 + \chi_3 = 180 \quad (168)$$

Despejando  $\beta$  para última ecuación se obtiene:

$$\beta + \chi_2 + 90 - \theta = 180 \quad (169)$$

$$\beta + 90 - \varphi + 90 - \theta = 180 \quad (170)$$

$$(171)$$

Con lo cual se obtiene:

$$\beta = \varphi + \theta \quad (172)$$

Para el ángulo de aceptación( $\sigma_{max}$ ) para la fibra óptica, el cual está dado en términos de la apertura numérica(NA) de la fibra como:

$$n_0 \text{sen}(\sigma_{max}) = \sqrt{n_n^2 - n_c^2} = NA \quad (173)$$

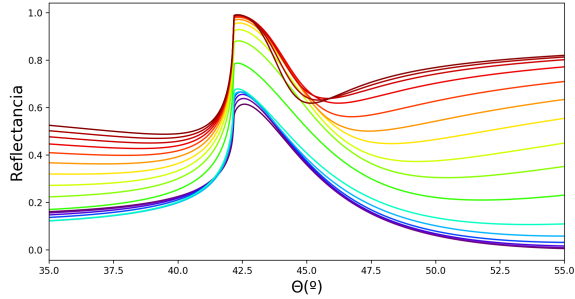
Pero de la relación(165) se obtiene entonces el valor más grande que tomara  $\varphi$ :

$$n_n \text{sen}(\varphi_{max}) = \sqrt{n_n^2 - n_c^2} \quad (174)$$

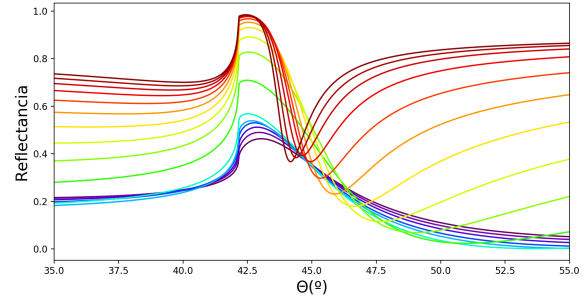
Esto es:

$$\varphi_{max} = \text{sen}^{-1} \left( \sqrt{1 - \left( \frac{n_c}{n_n} \right)^2} \right) \quad (175)$$

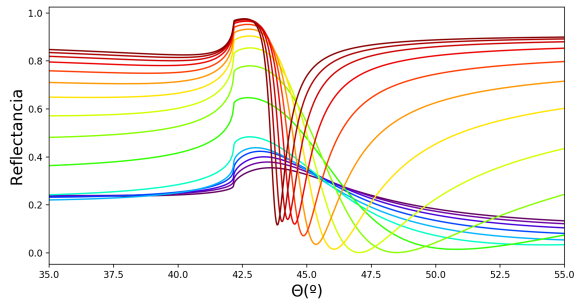
## 10.5. Dependencia de la formación de los SPR en función del espesor de la capa metálica del oro.



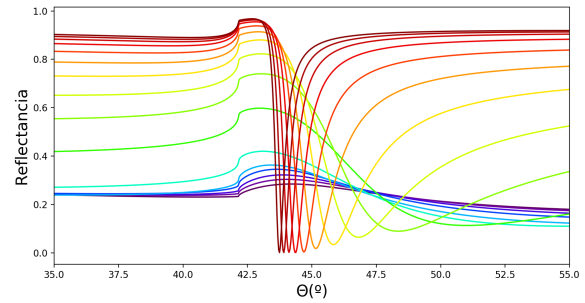
(a) Espesor de la película metálica  $d = 20nm$ .



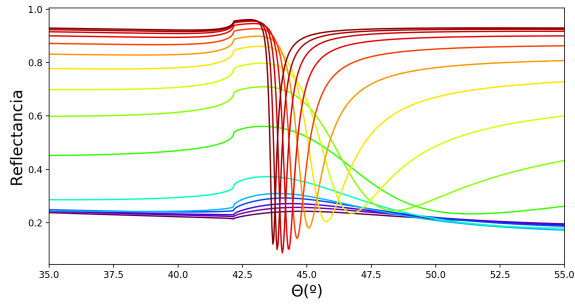
(b) Espesor de la película metálica  $d = 30nm$ .



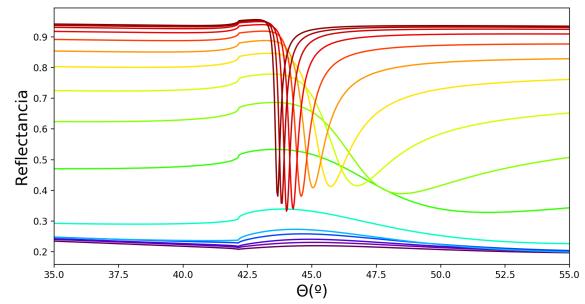
(c) Espesor de la película metálica  $d = 40nm$ .



(d) Espesor de la película metálica  $d = 50nm$ .



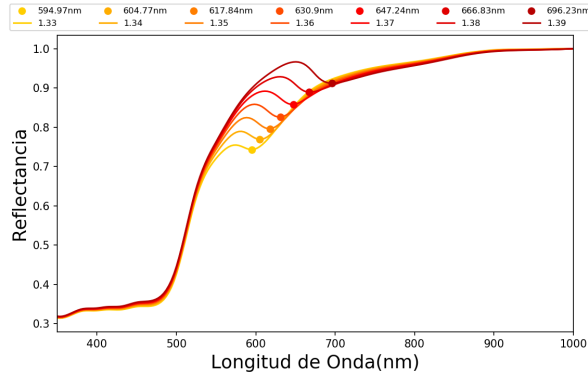
(e) Espesor de la película metálica  $d = 60nm$ .



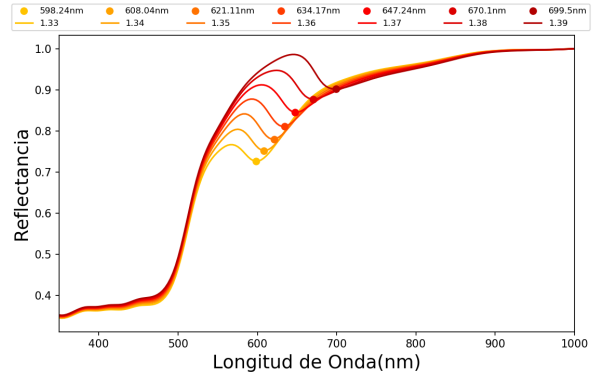
(f) Espesor de la película metálica  $d = 70nm$ .

Figura 30: Las figuras a) y b) fueron generadas con una simulación con los siguientes parámetros: El espesor de la película metálica tomaba valores desde 20nm hasta 70nm, medio dieléctrico(primer medio) con índice de refracción de 1.49 y las longitudes de onda tomadas fueron desde 380nm hasta los 750nm, el último medio vacío.

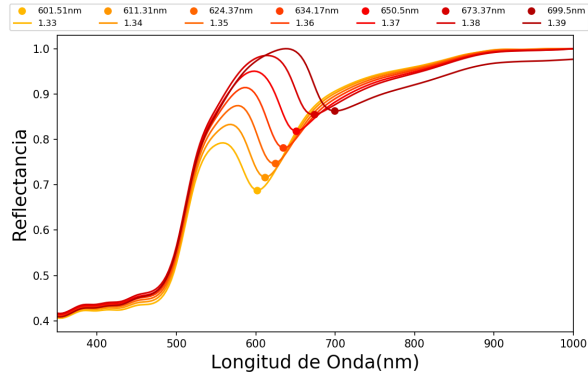
## 10.6. Reflectancia en función de la longitud de onda con IR variable del último medio.



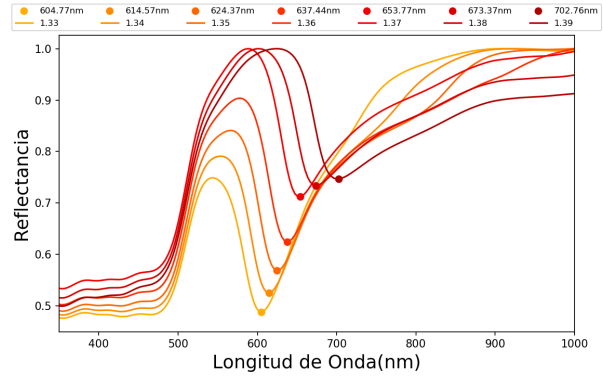
(a) Para ángulos desde  $[40 - 85]$



(b) Para ángulos desde  $[50 - 85]$



(c) Para ángulos desde  $[60 - 85]$ .



(d) Para ángulos desde  $[70 - 85]$ .

Figura 31: Las figuras desde la (31a) hasta (31d) fueron generadas para una simulación con los siguientes parámetros: El índice de refracción del último medio se varió desde 1,33 hasta 1,39, medio dieléctrico(primer medio) presento un índice de refracción de 1.49 y el último medio fue agua, donde los ángulos de incidencia en la película metálica se tomaron en diferentes rangos.

## 10.7. Inclusión de las nanopartículas de oro al sensor

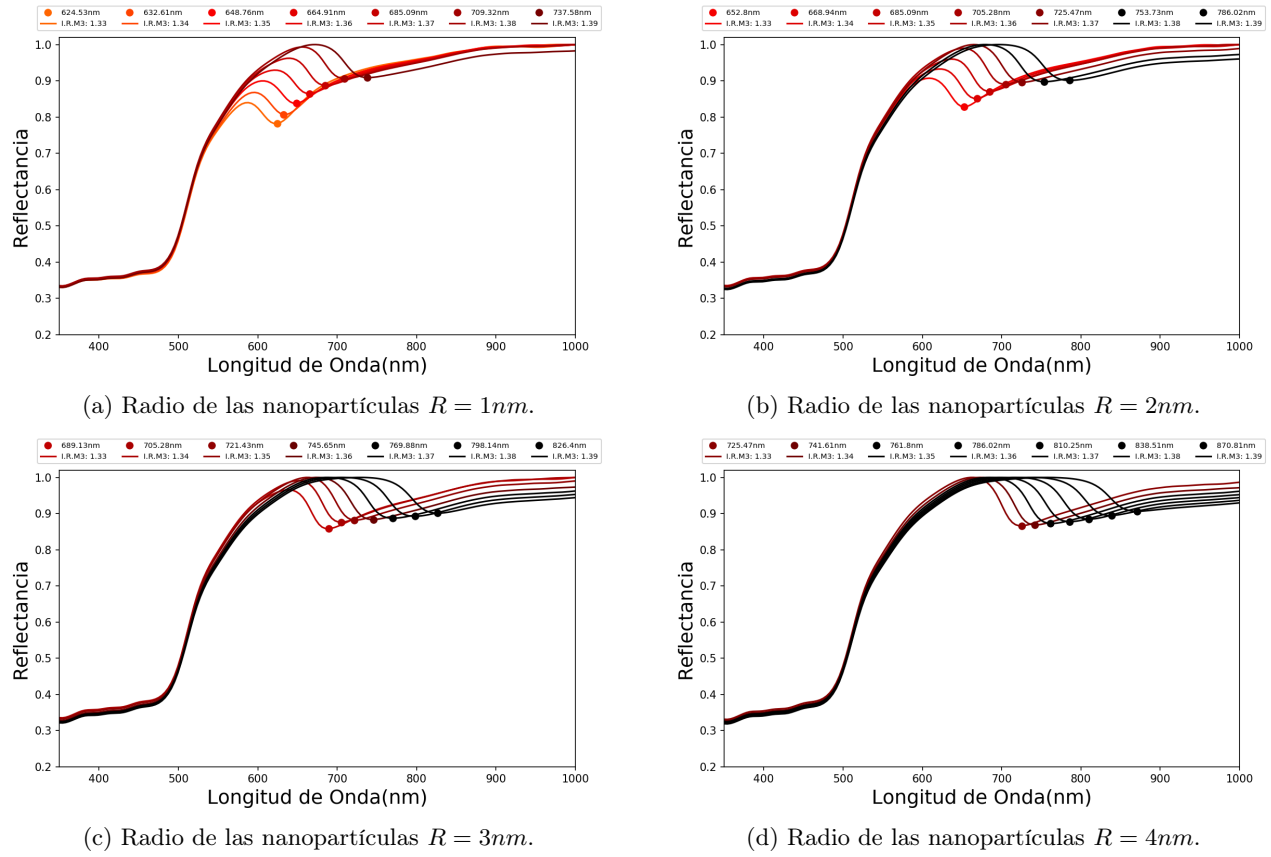


Figura 32: Las figuras desde la (32a) hasta (32d) fueron generadas para una simulación con los siguientes parámetros: El índice de refracción del último medio se varió desde 1,33 hasta 1,39, medio dieléctrico(primer medio) presento un índice de refracción de 1.49, los ángulos de incidencia de la luz en el sensor tomaron los valores desde 45 hasta 85, y la capa de nanopartículas de oro tomo diferentes espesores para el radio específico de las mismas.

## 10.8. Unidad de energía en electron-Volts

El electronvoltio (símbolo eV) es una cantidad de energía que representa la variación de energía que experimenta un electrón al moverse desde un punto de potencial  $V_a$  hasta un punto de potencial  $V_b$  cuando la diferencia del mismo es de 1V.

$$V_{ba} = V_b - V_a \quad (176)$$

Es decir, cuando la diferencia de potencial del campo eléctrico es de 1V. Su valor en Joules es  $1,602176634 \times 10^{-19} J$  en el sistema internacional de unidades SI. En física de altas energías, el electronvoltio resulta una unidad muy pequeña, por lo que son de uso frecuente múltiplos tales como mega-electron-voltio MeV o el giga-electron-voltio GeV. Algunos múltiplos típicos de esta cantidad son:

$$1keV = 10^3 eV \quad (177)$$

$$1MeV = 10^3 keV = 10^6 eV \quad (178)$$

$$1GeV = 10^3 MeV = 10^9 eV \quad (179)$$

$$1TeV = 10^3 GeV = 10^{12} eV \quad (180)$$

$$1PeV = 10^3 TeV = 10^{15} eV \quad (181)$$

$$1EeV = 10^3 PeV = 10^{18} eV \quad (182)$$

Esta cantidad de energía resulta adecuada para expresar por ejemplo, la frecuencia asociada a la energía de un sistema microscópico, como es el caso de un fotón ya que cuando se habla energía de este, se trabaja con cantidades de energía muy pequeñas, es por tal motivo que surge la necesidad de expresar la frecuencia en unidades eV. Si un fotón tiene una energía de un  $1eV$ , según la fórmula de Plank, la frecuencia sería la energía dividida por la constante de plank:

$$f = E/h \quad (183)$$

Si se desea saber a qué equivalente de un  $1eV$  en longitudes de onda en nano-metros, basta con saber que para un fotón la longitud de onda está dada por:

$$\lambda = c/f \quad (184)$$

Siendo  $c$  la velocidad de la luz, cuyo valor aceptado es  $299792458 m/s$ , con lo cual para la conversión de electron-Volts a  $nm$  o viceversa, se tendrá la siguiente expresión:

$$f = \frac{1241,7144}{\lambda} eV * nm \quad (185)$$

Donde  $\lambda$  debe estar en  $nm$ .

## Referencias

- [1] Vasimalla Yesudasu, Himansu Shekhar Pradhan, and Rahul Jasvanthbhai Pandya. Recent progress in surface plasmon resonance based sensors: A comprehensive review. *Heliyon*, 7(3):e06321, 2021.
- [2] Kyung-Min Byun. Development of nanostructured plasmonic substrates for enhanced optical biosensing. *J. Opt. Soc. Korea*, 14(2):65–76, Jun 2010.
- [3] Carsten Thirstrup Helmut Franz Neff Leiva Casemiro OliveiraAntonio, Marcus Nogueira Lima. *Surface Plasmon Resonance Sensors*. Springer, 2019.
- [4] Aleksandra Lobnik, Matejka Turel, and Špela Korent Urek. Optical chemical sensors: design and applications. In Wen Wang, editor, *Advances in Chemical Sensors*, chapter 1. IntechOpen, Rijeka, 2012.
- [5] Rahul Jasvanthbhai Pandya Vasimalla Yesudasu, Himansu Shekhar Pradhan. Recent progress in surface plasmon resonance based sensors: A comprehensive review. *Heliyon*, 7(3):1–13, 2021.
- [6] Warinya Chemnasiri and Florencio E. Hernandez. Gold nanorod-based mercury sensor using functionalized glass substrates. *Sensors Actuators: B. Chemical*, 173(Complete):322–328, 2012.
- [7] Chen Chen and Junsheng Wang. Optical biosensors: an exhaustive and comprehensive review. *Analyst*, 145:1605–1628, 2020.
- [8] Mauro Lomer, Carlos Galíndez, Antonio Quintela, Jesus Mirapeix, and J.M. López-Higuera. Refractometric sensor based on induced losses in the region of transition from a curved side-polished pof fiber. *Proc SPIE*, 7004, 04 2008.
- [9] Pedro Estrela, Pavel Damborský, Juraj Švitel, and Jaroslav Katrlík. Optical biosensors. *Essays in Biochemistry*, 60(1):91–100, 06 2016.
- [10] Rozalina Zakaria, NurAina’a Mardhiah Zainuddin, Muhammad Aiman Saufi Ahmad Fahri, Punithavathi M. Thirunavakkarasu, Shobhit K. Patel, and Sulaiman Wadi Harun. High sensitivity refractive index sensor in long-range surface plasmon resonance based on side polished optical fiber. *Optical Fiber Technology*, 61:102449, 2021.
- [11] Paul R. Stoddart Hong Siang Chua Alfred Jia Yee Tan, Sing Muk Ng. Theoretical model and design considerations of u-shaped fiber optic sensors: A review. *IEEE Sensors*, 20(20146017):14578 – 14589, 2020.
- [12] Paul R. Stoddart Hong Siang Chua Alfred Jia Yee Tan, Sing Muk Ng. Trends and applications of u-shaped fiber optic sensors: A review. *IEEE Sensors*, 21(20262326):120 – 131, 2020.
- [13] Banshi Dhar Gupta, Sachin Kumar Srivastava, and Roli Verma. *Fiber Optic Sensors Based on Plasmonics*. WORLD SCIENTIFIC, 2015.
- [14] Stefan A. Maier. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer, New York, NY, 2018. 1st ed.
- [15] Hyuk Rok Gwon and Seong Hyuk Lee. Spectral and angular responses of surface plasmon resonance based on the kretschmann prism configuration. *MATERIALS TRANSACTIONS*, 51(6):1150–1155, 2010.
- [16] Nianqiang W. Ming L., Scott K. C.
- [17] Kathryn M. Mayer and Jason H. Hafner. Localized surface plasmon resonance sensors. *Chemical Reviews*, 111(6):3828–3857, 2011. PMID: 21648956.
- [18] Palash Bharadwaj, Alexandre Bouhelier, and Lukas Novotny. Low-energy acoustic plasmons at metal surfaces. *Nature*, 106:226802, Jun 2007.
- [19] Andreas Otto. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, 216(4):398–410, Aug 1968.
- [20] Stéphane Berciaud, Laurent Cognet, Philippe Tamarat, and Brahim Lounis. Observation of intrinsic size effects in the optical response of individual gold nanoparticles. *Nano Letters*, 5(3):515–518, 2005. PMID: 15755105.

- [21] Victor Munoz-Berti, Ana Lopez-Perez, Benito Alén, José Costa-Krämer, Antonio García-Martín, Mauro Lomer, and J.M. López-Higuera. Low cost plastic optical fiber sensor based on surface plasmon resonance. *Proc. SPIE*, 7653, 09 2010.
- [22] E. Kretschmann and H. Raether. Notizen: Radiative decay of non radiative surface plasmons excited by light. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 23(12):2135 – 2136, 01 Dec. 1968.
- [23] Kolwas K. Demchenko I. Derkachova A. Dielectric function for gold in plasmonics applications: Size dependence of plasmon resonance frequencies and damping rates for nanospheres. *Plasmonics (Norwell, Mass.)*, 11(4):941–951, 2016.
- [24] E. Hecht. *Optics*. Pearson, 2012.
- [25] David J Griffiths. *Introduction to electrodynamics; 4th ed.* Pearson, Boston, MA, 2013. Re-published by Cambridge University Press in 2017.
- [26] John David Jackson. *Classical electrodynamics; 2nd ed.* Wiley, New York, NY, 1975.
- [27] P. B. Johnson and R. W. Christy. Optical constants of the noble metals. *Phys. Rev. B*, 6:4370–4379, Dec 1972.
- [28] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 8 edition, 2004.
- [29] James S. Walker and J. Gathright. A transfer-matrix approach to one-dimensional quantum mechanics using mathematica. *Computers in Physics*, 6(4):393–399, 1992.
- [30] Fabian Camilo Cubillos Morales. Resonancia de plasmón superficial en películas delgadas de zno. 08 2017.
- [31] Faires J. Douglas. Burden, Richard L. *Análisis numérico*. Cengage Learning, Mexico, MX, 519.62/.65 BUR-Bloque 4, 2011. 9a. ed.
- [32] Steven J. Byrnes. Multilayer optical calculations, 2016.
- [33] M. Weber. *Handbook of Optical Materials (1st ed.)*. CRC Press, 2018. 1st ed.
- [34] Han Y. Li Y. Tsai H. L. Xiao H. Wei, T. Temperature-insensitive miniaturized fiber inline fabry-perot interferometer for highly sensitive refractive index measurement. *Optics express*, 16(8):5764–5769, 2008.
- [35] Viktor Myroshnychenko, Jessica Rodríguez-Fernández, Isabel Pastoriza-Santos, Alison M. Funston, Carolina Novo, Paul Mulvaney, Luis M. Liz-Marzán, and F. Javier García de Abajo. Modelling the optical response of gold nanoparticles. *Chem. Soc. Rev.*, 37:1792–1805, 2008.
- [36] Carolina Novo, Daniel Gomez, Jorge Perez-Juste, Zhenyuan Zhang, Hristina Petrova, Maximilian Reismann, Paul Mulvaney, and Gregory V. Hartland. Contributions from radiation damping and surface scattering to the linewidth of the longitudinal plasmon band of gold nanorods: a single particle study. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 8:3540–3546, 2006.
- [37] Steven J. Byrnes. Multilayer optical calculations. *arXiv*, page 20, November 19 2019.