



---

# Máster Interuniversitario en Plasma, Laser y Tecnologías de Superficie

Trabajo Fin de Máster

**SIMULACIÓN DE CAMPOS ELECTROMAGNÉTICOS EN INTERCARAS**  
**Plasmones, ondas de Bloch y radiación Cherenkov sintonizada**

**Antonio Ganfornina Andrades**

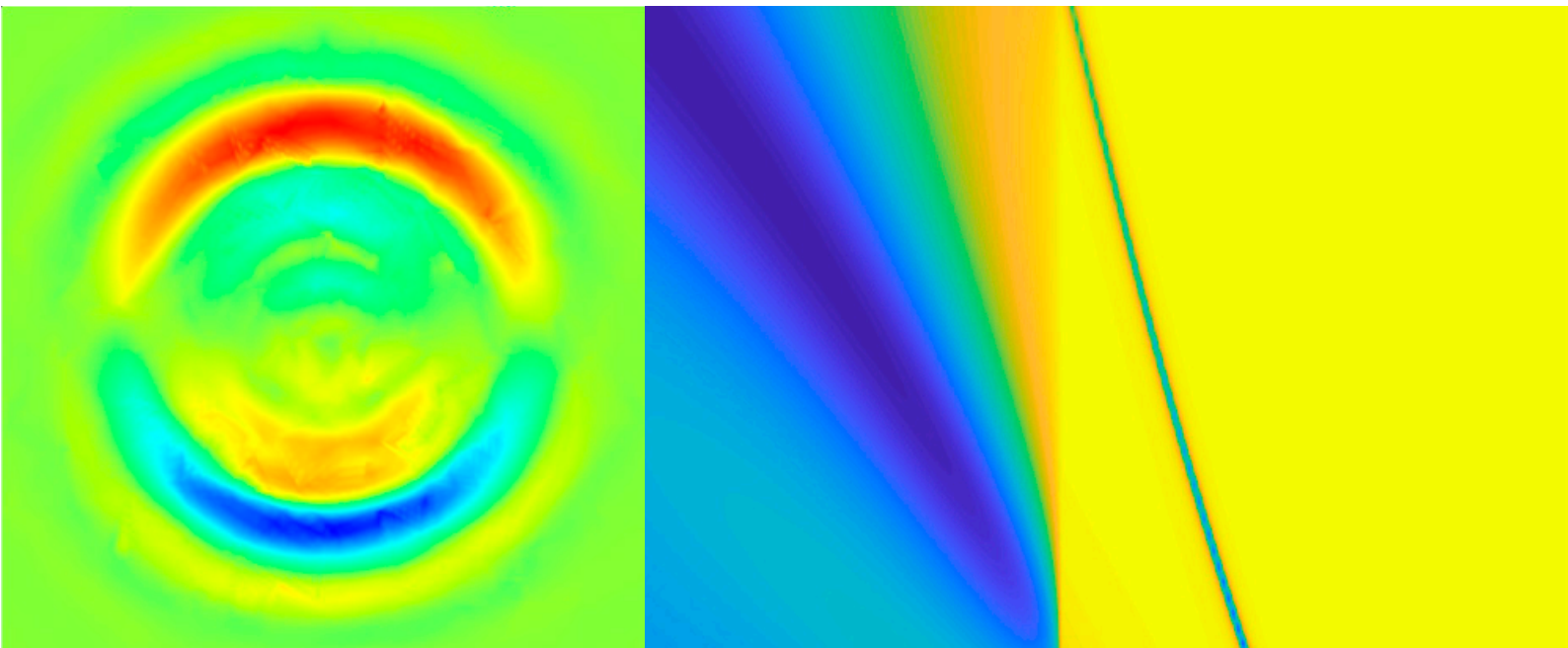
**Diciembre de 2020**



# SIMULACIÓN DE CAMPOS ELECTROMAGNÉTICOS EN INTERCARAS

PLASMONES, ONDAS DE BLOCH Y RADIACIÓN CHERENKOV SINTONIZADA

Antonio Ganfornina Andrades  
Tutor: D. Francisco Yubero Valencia



TRABAJO DE FIN DE MÁSTER  
DICIEMBRE DE 2020



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

Máster Interuniversitario en  
Plasma, Láser y Tecnologías de Superficies





*A todas las personas que me transmitieron sus enseñanzas, sobre todo aquellas que llegaron antes de que naciera. Pues me demostraron que una biblioteca tranquila, nunca está tranquila en absoluto. Sus enseñanzas aún resuenan a través de las eras.*



## Resumen

En este trabajo, se presentan los fundamentos sobre excitaciones de ondas de superficie en intercaras metal-dieléctrico y en cristales fotónicos truncados mediante fuentes de luz o electrones rápidos, en un caso como base de sensores mediados por interacciones con campos evanescentes y en el otro como punto de partida para la emisión de radiación Cherenkov modulada. Los análisis reportados ponen de manifiesto distintas fenomenologías asociadas a la excitación de plasmones y onda de Bloch de superficie en configuración Kretschmann como fundamento de dispositivos de sensado. Así se visualizan aspectos característicos de éstas como son mapas de reflectancia o longitudes de penetración de campos evanescentes, además de justificar el diseño de una plataforma para el sensado de moléculas quirales en disolución. Por otro lado, se describe una familia reciente de dispositivos para la caracterización de partículas cargadas mediante la emisión de radiación Cherenkov modulada a través de la excitación de plasmones de superficie en estructuras multicapa. Para ello se emplea la librería WaveOptics de COMSOL Multiphysics, herramienta de cálculo numérico basada en resolución de ecuaciones fundamentales en entornos geométricos complejos mediante métodos de elementos finitos, dotada de un entorno gráfico robusto y accesible para realizar simulaciones precisas y en tiempos de cálculos reducidos. Se han puesto de manifiesto fenómenos electromagnéticos en intercaras difícilmente accesibles mediante cálculo analítico, que pueden utilizarse como punta de lanza para el diseño y fabricación de nuevas plataformas experimentales.





## **Abstract**

In this work, we present the fundamentals of surface wave excitations on metal-dielectric interfaces and truncated photonic crystals by means of light sources or fast electrons, in one case as the basis for sensors mediated by interactions with evanescent fields and in the other case as a starting point for the emission of modulated Cherenkov radiation. The reported analyses show different phenomenologies associated with the excitation of plasmons and surface Bloch waves in Kretschmann configuration as a basis for sensing devices. This shows characteristic aspects of these devices such as reflectance maps or evanescent field penetration lengths, as well as justifying the design of a platform for the sensing of chiral molecules in solution. On the other hand, a recent family of devices for the characterisation of charged particles involving the emission of Cherenkov radiation modulated through the excitation of surface plasmons in multilayer structures is described. The WaveOptics library of COMSOL Multiphysics is used for this purpose. This is a numerical calculation tool based on the resolution of fundamental equations in complex geometric environments using finite element methods, equipped with a robust and accessible graphic environment for accurate simulations and reduced calculation times. Electromagnetic phenomena have been shown to occur at interfaces that are difficult to access through analytical calculation, which can be used as a spearhead for the design and manufacture of new experimental platforms.



# Índice general

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	Objetivos . . . . .	3
1.2	Fundamento del método de elementos finitos . . . . .	3
1.2.1	COMSOL Multiphysics: WaveOptics . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Excitación de modos superficiales por ondas planas</b>	<b>9</b>
2.1	Plasmones de superficie en intercaras metal-dieléctrico . . . . .	9
2.1.1	Introducción . . . . .	9
2.1.2	Ondas de superficie en la intercara entre dos medios . . . . .	11
2.1.3	Función dieléctrica en metales . . . . .	14
2.1.4	Características de SPPs en intercaras metal-dieléctrico . . . . .	15
2.1.5	Relación de dispersión y condición de excitación . . . . .	17
2.1.6	Excitación SPP mediante reflexión interna total frustrada . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Onda superficiales de Bloch BSW</b>	<b>23</b>
3.1	Ondas BSW en cristales fotónicos truncados . . . . .	23
3.2	Comparativa con plasmones de superficie . . . . .	28
3.3	Sensado de moléculas quirales basado en BSW . . . . .	29
<b>4</b>	<b>Excitación de modos superficiales por electrones</b>	<b>33</b>
4.1	Introducción . . . . .	33
4.2	Excitación de plasmones mediante electrones rápidos . . . . .	34
4.2.1	Excitación perpendicular de plasmones de superficie por electrones . . . . .	34
4.2.2	Excitación paralela de plasmones de superficie por electrones . . . . .	37
4.3	Excitación de radiación Cherenkov acoplada a SPP . . . . .	40
4.3.1	Descripción cualitativa de la radiación Cherenkov . . . . .	41
4.3.2	Distribución espectral . . . . .	44
4.3.3	Emisión Cherenkov en intercaras entre varios medios . . . . .	45

4.3.4	Emisión Cherenkov por plasmones SPPs en SPCLS . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>53</b>
<b>A</b>	<b>Simulaciones</b>	<b>55</b>
A.1	Excitación de plasmones SPP . . . . .	55
A.2	Modelado de cristales fotónicos 1DPC . . . . .	57
A.3	Radiación Cherenkov . . . . .	59
A.3.1	Estudio temporal . . . . .	59
A.3.2	Estudio en frecuencia . . . . .	59

# Capítulo 1

## Introducción

La interpretación de fenómenos físicos a partir de la resolución de ecuaciones analíticas atiende a dos propósitos: el primero es servir de base para obtener una visión cuantitativa capaz de predecirlos, el segundo es dotar de herramientas adecuadas para proyectar la comprensión necesaria para abordar otras fenomenologías más complejas.

En sistemas simples (medios materiales homogéneos, geometrías sencillas) la posibilidad de una solución analítica a partir de las leyes fundamentales (por ejemplo, las ecuaciones de Maxwell en el caso de fenómenos electromagnéticos) conducen a esquemas ampliamente descritos y tratados en la bibliografía [1,2]. No obstante, y con bastante frecuencia, en problemas complejos las soluciones analíticas se tornan inviables debido a diversos factores, entre los que se puede enumerar la presencia de geometrías más elaboradas, agrupaciones de distintos medios materiales, constantes características dependientes de una o múltiples variables o, a veces, simplemente, un tiempo de cálculo algebraico valioso.

Por ello, el desarrollo de herramientas de cálculo numérico que dan soporte a resultados experimentales ha comenzado a sustituir las aproximaciones analíticas para visualizar el comportamiento de fenómenos complejos. Existen distintas opciones disponibles, tanto en el mercado (Maple, SCILAB, MATLAB, GNU Octave, CST Studio, etc) como en formato en código abierto (FreeMat, pandas, SageMath, Shogun, PAW, etc). Por describir las bondades de algunas de ellas, por ejemplo, MatLab [3] se ofrece como un sistema de cómputo numérico que ofrece un entorno de desarrollo integrado en un lenguaje propio de cara a unas prestaciones básicas pero versátiles. Su principal baza es la manipulación de matrices de elementos como puente a la representación de datos. Además, contiene una serie de librerías que expande sus prestaciones a diversos campos como la aeronáutica, microelectrónica o la biología. CST Studio, en contraposición, ofrece unas prestaciones mucho más focalizadas al diseño, análisis y optimización de componentes y sistemas electromagnéticos. Sus librerías, a su vez, pueden complementarse de forma simultánea para realizar simulaciones híbridas, eficientes y flexibles para

el estudio de antenas, filtros, compatibilidad electromagnética, interferencias, exposición de tejidos a campos electromagnéticos, entre otros. No obstante, su interfaz y la implementación de dichos fenómenos puede dificultar la labor de aprendizaje e interpretación de resultados.

Una opción conciliadora entre la potencia de cálculo, la resolución de fenómenos complejos desde una metodología accesible, una curva de aprendizaje adaptada (guiada por múltiples tutoriales en formato pdf) y una amplia gama de librerías que lo dotan de versatilidad es COMSOL Multiphysics. Gracias a sus prestaciones como software de análisis y resolución por métodos de elementos finitos (MEF), COMSOL es una opción versátil para problemas convencionales de campos como la acústica [4], la física de fluidos [5], el trazado de partículas [6] y, por supuesto, el estudio de campos electromagnéticos [7,8] en distintos regímenes (ultravioleta, visible, infrarrojo, radiofrecuencias, ...). Es por todo ello que sus múltiples librerías adaptadas para distintos campos de aplicaciones académicas, científicas e industriales, lo capacitan como punta de lanza para futuros desarrollos y líneas de investigación. Más específicamente, en este trabajo se emplea la librería Wave Optics incluida en su versión 5.4 para simular el comportamiento electromagnético en el espectro visible de distintas configuraciones de medios materiales a escalas de cientos de nanómetros. Dicho rango de escalas surge con el deseo de verificar diversas fenomenologías que tienen lugar en sistemas fotónicos singulares, en concreto, modos de propagación de ondas superficiales [9], y su relación con sensores plasmónicos o basados en cristales fotónicos truncados, o con fuentes de luz inducidas por radiación Cherenkov [10].

Aunque el trabajo desarrollado se ha centrado en la puesta a punto de una herramienta de análisis y simulación para describir unas fenomenologías electromagnéticas concretas, su posible uso es mucho más general, de manera que tiene aplicación en el estudio de cualquier de problemas de fenómenos electromagnéticos. Los resultados aquí mostrados facilitan la labor de interpretación de la base teórica que gobierna cada una de estas excitaciones como nexa a la discusión de un marco de referencia para distintas aplicaciones tecnológicas, las cuales se encuentran en estos momentos en desarrollo, basadas en los fenómenos que vertebran este trabajo. En particular, se hace énfasis en los fundamentos de funcionamiento de sensores basados en la interacción del campo evanescente de excitaciones de superficie con el medio con el que estén en contacto, así como el desarrollo de sensores SPCLS (Surface Polariton Cherenkov Light Sources) [11] basados en la radiación Cherenkov.

## 1.1 Objetivos

Los objetivos de este trabajo son:

- La puesta a punto de herramientas de análisis y simulación de campos electromagnéticos mediante métodos de elementos finitos. En concreto la librería WaveOptics de COMSOL Multiphysics, para su aplicación en el estudio de sistemas con interés científico y tecnológico en aplicaciones fotónicas.
- Estudiar los fundamentos sobre excitaciones de ondas de superficie con radiación electromagnética en intercaras metal/dieléctrico (plasmones de superficie) y cristales fotónicos truncados (ondas superficiales de Bloch). Poner de manifiesto los principios de operación de sensores basados en estas fenomenologías.
- Estudiar los fundamentos sobre excitaciones de ondas en superficie con haces de electrones. Poner de manifiesto los principios de operación de fuentes de luz por interacción de plasmones de superficie con radiación Cherenkov.

## 1.2 Fundamento del método de elementos finitos

La descripción cuantitativa de los fenómenos físicos se expresa generalmente en términos de ecuaciones en derivadas parciales. Para una inmensa mayoría de configuraciones geométricas y problemas reales, estas ecuaciones diferenciales no pueden resolverse de forma analítica. En su lugar, se recurre a métodos que proporcionan soluciones aproximadas, que utilizan distintos métodos de discretización. Esto no debe interpretarse como una pérdida de fidelidad en la resolución del problema, en tanto que las soluciones analíticas se encuentran, con frecuencia, sujetas a restricciones y modelos que constituyen una simplificación de la naturaleza (como, por ejemplo, localizar la masa en el centro de gravedad o reducir un haz láser a un segmento rectilíneo con la misma sección eficaz en todo su recorrido).

El método de elementos finitos (MEF) utiliza métodos numéricos para resolución de ecuaciones diferenciales [12]. Esta metodología convierte un problema a resolver en un dominio determinado definido, a priori, en términos de una formulación en ecuaciones diferenciales, en un problema algebraico para un número finito de puntos seleccionados del dominio a estudiar. Este método considera cada uno de los puntos donde se evalúa el problema. Dichos puntos reciben la denominación de nodo (node) y el conjunto de estos forma una red, denominada malla (mesh), conformado por estos retículos. Cada uno de los retículos contenidos en dicha malla constituye un elemento finito (ver Figura 1.1). El conjunto de nodos se obtiene discretizando el recinto (volumen o superficie) en que se desea resolver el problema en elementos de forma variada. De esta manera, la solución obtenida por MEF es solo aproximada, ya que la evaluación se realiza solo en un número finito de puntos y para el resto del espacio, la solución se obtiene interpolando a partir de los resultados obtenidos para los nodos.

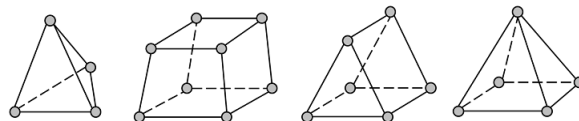


Figura 1.1: Representación tridimensional de los posibles criterios de selección geométricos de elementos finitos: tetrahedros, hexaedros, prisma triangular y pirámide, respectivamente. Los círculos grises representan las esquinas, o nodos, de los elementos. Se puede utilizar cualquier combinación de los cuatro elementos anteriores. (Para el modelado 2D, están disponibles elementos triangulares y cuadriláteros).

Desde el punto de vista práctico, las labores necesarias para realizar un cálculo mediante el método de elementos finitos se secuencia de forma modular en tareas de preproceso, cálculo y posprocesado. Las tareas previas a las labores del cálculo numérico en bruto son, con total seguridad, las más estimulantes de cara a la correcta implementación del fenómeno. Entre estas tareas se encuentran la correcta definición de una geometría, la generación de una malla adaptada a la fenomenología y al rango de escalas del problema, la asignación de propiedades físicas (temperatura, índice de refracción, viscosidad, deformación, conductividad, etc) y, sin duda, las más decisivas de cara a dar respuesta a un fenómeno; las condiciones de contorno (Dirichlet, von Neumann), fuentes adicionales (foco térmico, densidad de corriente externa, emisión de partículas) y ciertos artefactos numéricos que permiten abordar problemas muy específicos, como por ejemplo las PMLs, esenciales de cara a resolver problemas de ondas electromagnéticas que se propagan en un dominio infinito (a pesar de que se define un dominio finito). En esta etapa es crítico, por tanto, identificar y definir de forma adecuada la física y condiciones de contorno, junto con el mallado a evaluar, con el propósito de garantizar la convergencia de los métodos de cálculo numérico. En la siguiente etapa se evalúan, mediante métodos aproximados soluciones discretas en los nodos del mallado seleccionado bajo las condiciones fijadas en la etapa anterior. Según la ecuación a resolver este proceso puede resolverse mediante distintos algoritmos de computación por método de elementos finitos. En la última etapa del proceso de cálculo, COMSOL extrapola los valores obtenidos de las magnitudes evaluadas en los nodos del mallado elegido al resto del espacio, a través de un proceso de extrapolación y/o suavizado, además de evaluar posibles errores en las soluciones encontradas.

### 1.2.1 COMSOL Multiphysics: WaveOptics

El método de los elementos finitos es, como se ha presentado, una herramienta poderosa para la resolución general de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDP). Para problemas de tipo electromagnético, aunque también puede emplearse para problemas en transitorio, se emplea ampliamente en estudios en el dominio en frecuencia, esto es, para soluciones estacionarias de ecuaciones en derivadas parciales en notación de transformada de Fourier. Sin embargo, la auténtica valía del método



de los elementos finitos emerge a la hora de resolver problemas en geometrías complejas e irregulares. Otros métodos de resolución numérica como el método de las diferencias finitas en dominio temporal (FDTD, de Finite Difference Time Domain), que vertebran el núcleo de otros programas (CST Studio Suite), pueden emplearse para resolver problemas en geometrías complejas. Sin embargo, requiere un mallado extremadamente fino y el tiempo de computación puede elevarse considerablemente. Por ese motivo, el método de los elementos finitos y, en concreto, la presentación del mismo a través de la interfaz de COMSOL Multiphysics, resulta apropiado para el propósito de este trabajo.

Para problemas electromagnéticos, esta librería parte de las ecuaciones de Maxwell:

$$\nabla \times \vec{E} = -i\omega\mu_r\mu_0\vec{H} \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = i\omega\varepsilon_r\varepsilon_0\vec{E} \quad (1.2)$$

Donde  $\varepsilon_0$  y  $\mu_0$  son la permitividad y permeabilidad del vacío,  $\varepsilon_r$  y  $\mu_r$  son las permitividad y permeabilidad relativa, respectivamente. COMSOL Multiphysics resuelve, en primera instancia, la ecuación:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu_r} \nabla \times \vec{E} - \omega^2 \varepsilon \mu \vec{E} = 0 \quad (1.3)$$

Descomponiendo esta ecuación vertebral en sus componentes longitudinales y transversales:

$$\nabla_T \times \frac{1}{\mu_r} \nabla_T \times \vec{E}_T - i\beta \frac{1}{\mu_r} (\nabla_T E_z + i\beta \vec{E} - T) - \omega^2 \varepsilon \mu_0 \vec{E}_T = 0 \quad (1.4)$$

$$\nabla_T \times \frac{1}{\mu_r} (\nabla_T E_z + i\beta \vec{E}_T) \times \vec{u}_z - \omega^2 \varepsilon \mu_0 E_z \vec{u}_z = 0 \quad (1.5)$$

Donde  $\beta$  es la constante de propagación de la onda electromagnética. El subíndice  $T$  y  $z$  hacen referencia a las componentes transversales y longitudinales, respectivamente. Manipulando las variables [13], se obtienen la siguiente dupla de ecuaciones:

$$\nabla_T \times \frac{1}{\mu_r} \nabla_T \times \vec{e}_T - k_0^2 \varepsilon_r \vec{e}_T = \frac{-\beta^2}{\varepsilon_r} \left( \nabla_T \frac{e_z}{k_0} + \vec{e}_T \right) \quad (1.6)$$

$$\beta^2 \left[ \frac{1}{k_0} \nabla_T \frac{1}{\mu_r} \left( \nabla_T \frac{e_z}{k_0} + \vec{e}_z \right) + \varepsilon_r e_z \right] = 0 \quad (1.7)$$

Donde  $k_0$  es el vector de onda en el vacío. Estas dos ecuaciones acopladas con las condiciones de contorno apropiadas son el núcleo de resolución de la librería WaveOptics de COMSOL Multiphysics. Más aún, dado que la comprensión de las condiciones de contorno determina unívocamente una solución convergente del problema, el paquete WaveOptics integra las condiciones de contorno de un conductor magnético perfecto (PMC):

$$\vec{n} \times \vec{h}_T = 0 \quad h_z = 0 \quad (1.8)$$

De manera análoga, se incluye en la librería las condiciones de contorno para un conductor eléctrico perfecto (PEC):

$$\vec{n} \times \vec{e}_T = 0 \quad e_z = 0 \quad (1.9)$$

Donde  $\vec{n}$  es el vector normal a la superficie donde se aplica la condición de contorno del dominio estudiado. Al reducir este problema diferencial a una formulación algebraica, COMSOL Multiphysics, parte de la formulación diferencial para todos los problemas físicos:

$$-\nabla \cdot (c\nabla u) + au = f \quad a = \varepsilon_r \mu_r k_0^2 + k_0 \nabla \vec{e}_z \quad c = 1 \quad f = 0 \quad (1.10)$$

Esta ecuación se corresponde con la formulación general y en ella pueden identificarse los términos de la ecuación (1.7). En donde  $a$  es el término de Helmholtz,  $c$  un parámetro de difusión,  $u$  la función de valores a resolver y  $f$  un término adicional de fuentes (nulo para ondas planas monocromáticas y distinto de cero para partículas cargadas). A continuación, se define el dominio  $\Omega$ , limitado por el contorno  $\partial\Omega$  con las condiciones de contorno de Dirichlet, esto es, se imponen valores a las variables físicas (y no a sus derivadas) en el perímetro delimitador de cada dominio definido tal que la función  $u$  tome el valor de una función  $r$  cualquiera, que representa a una magnitud física (temperatura en una pared del recinto, amplitud de una onda en la frontera de dominio, afluencia de partículas, etc):

$$u = r \quad (1.11)$$

Lo traslada al problema equivalente integral, es decir, encontrar un autofunción  $u$  que verifique:

$$\int_{\Omega} (c\nabla u \cdot \nabla v + auv - fv) d\tau = 0 \quad (1.12)$$

Para toda función  $v$  de cuadrado integrable definida en el dominio, tal que se anule en el contorno. A continuación, discretiza un dominio continuo en elementos finitos, generalmente triángulos en el caso bidimensional o tetraedros en el caso 3D. Luego, numera de 1 a  $n_0$  a los vértices interiores y de  $n_0 + 1$  a  $n$  a los vértices exteriores. Esto permite reducir las exigencias de la función integrable a un número finito de funciones. Para ello, COMSOL segrega el dominio mediante polinomios de grado uno  $w_i$  con  $i = 1, n$  tal que cumplan la siguiente condición:

$$w_i(a_j) = 1 \quad j = i \quad w_i(a_j) = 0 \quad j \neq i \quad (1.13)$$

Se busca entonces:

$$u(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{n_0} u_j w_j(\vec{r}) + \sum_{j=n_0+1}^n r_j w_j(\vec{r}) \quad (1.14)$$

De tal manera, imponiendo que esta función cumpla la ecuación integral para los polinomios de grado 1, se obtiene, como ya se ha descrito, un sistema lineal de ecuaciones algebraicas.

$$\sum_{j=1}^{n_0} K_{ij} u_j + \sum_{j=1}^{n_0} M_{ij} M_{ij} u_j = B_i \quad (1.15)$$

De tal manera, el sistema de ecuaciones a resolver es lineal en el que la matriz  $K_{ij}$  es la matriz de rigidez del sistema y  $M_{ij}$  se corresponde con la matriz de densidad del mismo. De ellas se pueden obtener formas bilineales con un sentido físico definido, como por ejemplo la energía electrostática en un problema de Poisson.

En términos globales, si así se requiriese, a la hora de contemplar todo tipo de fenómenos asociados (disipativos, interferencias, absorción, difusión, etc), COMSOL resuelve la ecuación general:

$$e \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f \quad (1.16)$$

En su paso a un problema de autovalores algebraico, identificando la derivada temporal con el autovalor:

$$e(\lambda - \lambda_0)^2 u - d(\lambda - \lambda_0)u + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f \quad (1.17)$$

En donde  $\alpha, \beta, a, b, c, d, e$  son parámetros asociados a fenómenos no lineales y  $f$  un término adicional de fuentes inhomogéneas. Con todo ello, es de vital importancia, para la correcta interpretación de las soluciones del problema, elegir un mallado adecuado, ya que el error cometido en la discretización es de orden de la distancia típica entre los vértices de los elementos al cuadrado para polinomios de grado uno. Por ello, bajo ciertas especificaciones, pueden emplearse polinomios de grado dos o superior, reduciendo el error cometido, a coste de un mayor tiempo de cálculo.

El objeto de estudio del presente trabajo es la simulación de campos electromagnéticos en estructuras fotónicas singulares, por lo que se emplea el módulo WaveOptics de COMSOL Multiphysics, en el cual las ecuaciones subyacentes para fenómenos electromagnéticos (en las simulaciones realizadas nos referimos a la ecuación de Helmholtz y la ecuación de ondas en dominio temporal) están disponibles por defecto. Este módulo es adecuado para la resolución de problemas a frecuencias ópticas (correspondientes a longitudes de onda entre el micrómetro y el nanómetro). Junto las características propias de COMSOL Multiphysics, dicho módulo se presta como una herramienta polivalente y accesible en distintas áreas, entre las que se puede enumerar fibras ópticas, guías de ondas fotónicas, cristales fotónicos, óptica no lineal, cavidades resonantes, o dispositivos fotónicos activos.

Las librerías físicas del módulo WaveOptics, a través de la interfaz que se ilustra en la Figura 1.2, cubren la propagación de ondas electromagnéticas en el plano, en condiciones axisimétricas y en 3D, junto con un análisis completo vectorial en dos y en tres dimensiones de simulaciones de campos electromagnéticos en dominio temporal, en frecuencia, análisis de armónicos y autovalores. A su vez, siendo el motivo principal de elección como herramienta de trabajo para este estudio, el módulo WaveOptics permite implementar medios materiales no homogéneos, anisotrópicos, con ganancias o pérdidas junto a definiciones personalizadas de la función dieléctrica. Además, el módulo [14] permite la evaluación de los coeficientes de reflexión, transmisión y absorción a partir de puertos de excitación con ondas de potencia y modo ajustable y añadir capas perfectamente ajustadas (PMLs) para simular ondas electromagnéticas que se propagan en un dominio sin límites, característica que será indispensable en la excitación de modos de superficie a través de fuentes puntuales.

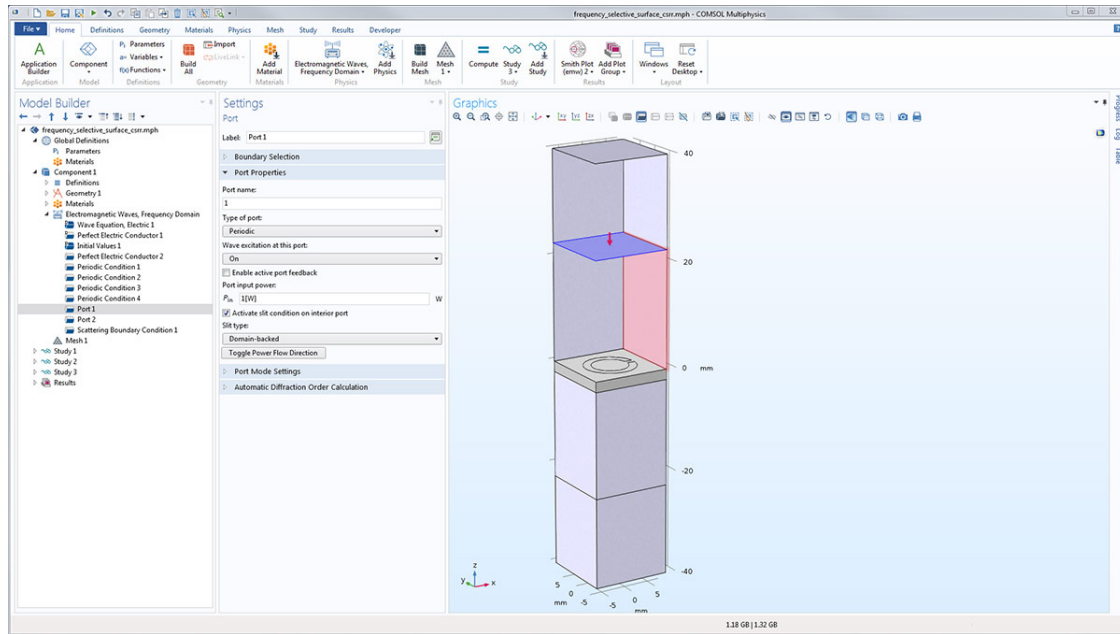


Figura 1.2: Interfaz de COMSOL Multiphysics. Diseño de un resonador de anillo.

Hay que mencionar que en este trabajo no se pretende proporcionar una guía de uso del software, la cual está disponible en la web de la aplicación [14], sino su utilización para ayudar a interpretar fenomenologías electromagnéticas singulares, en muchas ocasiones nada intuitivas. En los capítulos siguientes se van a ilustrar las posibilidades de simulación de excitaciones de modos de superficie en intercaras, mediante el uso de fuentes de luz monocromáticas y, finalmente, mediante haces de electrones rápidos, poniendo de manifiesto su interacción con la radiación Cherenkov.

## Capítulo 2

# Excitación de modos superficiales por ondas planas

En este capítulo, primero se describen conceptos fundamentales relacionados con la excitación con luz de ondas evanescentes en intercaras metal-dieléctrico (polaritones de plasmón de superficie, SPP, acrónimo del inglés, surface plasmon polariton) [15]. Las evaluaciones de las distintas magnitudes para ilustrar su fenomenología, modos de excitación, distancia de penetración de los campos, distribución en intercaras metal-dieléctrico y dependencia con el índice de refracción, se realizan mediante un estudio en el dominio en frecuencia, con luz incidente a través de puertos periódicos e imponiendo condiciones de contorno periódicas de Floquet [16], con el módulo WaveOptics de COMSOL Multiphysics.

### 2.1 Plasmones de superficie en intercaras metal-dieléctrico

#### 2.1.1 Introducción

Muchos siglos antes de que el mundo científico ocupase sus labores de investigación en las propiedades ópticas de las nanoestructuras metálicas, ya los romanos poseían la tecnología para fabricar objetos que presentaban propiedades singulares, como es el caso de la famosa Copa de Licurgo (ver la Figura 2.1), la cual presenta un color diferente dependiendo de si se la ilumina desde el exterior (color por reflexión, en este caso verdoso) o desde el interior (color por transmisión, rojo). A esta propiedad del vidrio empleado en la fabricación de este objeto se le denomina dicroísmo, y es debido a la respuesta óptica de las nanopartículas metálicas de oro y plata que forman parte del vidrio utilizado en su fabricación. En concreto a la excitación de modos colectivos de los electrones localizados en la superficie de estas nanopartículas.



Figura 2.1: Copa de Licurgo, Imperio Romano 400 d.C. Presenta un color verdoso en condiciones de reflexión y rojizo cuando su iluminación es desde su interior.

Los primeros trabajos científicos que reportaron este fenómeno corresponden a Wood [17] en 1902, el cual descrito teóricamente por primera vez por Ritchie [15] (1957) en partículas y superficies planas de metales. Cabe mencionar en esta introducción que el concepto de polaritón (cuasipartícula resultante de la oscilación colectiva de los electrones como resultado de la interacción de la luz con la materia) lo introdujo Fano [18] en 1941. Por otro lado, fue en 1968 cuando Otto [19] y Kretschmann-Raether [20] presentaron dos sencillos métodos de excitación de SPP en capas de metales nobles, estableciéndose así las bases de lo que hoy se conoce como Plasmónica. En la actualidad, el estudio de las propiedades electromagnéticas de las intercaras metal-dieléctrico suscitan gran interés debido a las aplicaciones tecnológicas avanzadas (sensores plasmónicos, Raman amplificado, ...) en las que esta interacción es clave. A modo de ejemplo la Figura 2.2 muestra el esquema de funcionamiento de un biosensor plasmónico. En particular, la excitación de plasmones de superficie con luz visible es la base de toda una familia de sensores de alta sensibilidad [21–23], cuyas fundamentos y características más importantes se van a describir a lo largo de este capítulo.

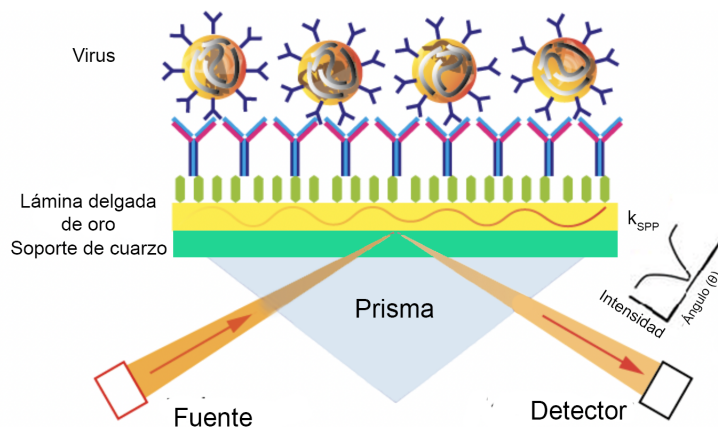


Figura 2.2: Esquema de sensores plasmónicos.

En este capítulo, después de una breve descripción teórica de las características y condiciones para la excitación de los polaritones de plasmones de superficie (en adelante SPP) en intercaras metal-dieléctrico, se ilustrarán algunos aspectos fundamentales que justifican su uso en sensores plasmónicos.

### 2.1.2 Ondas de superficie en la intercara entre dos medios

Los polaritones de plasmón superficial son estados acoplados entre un plasmón de superficie (oscilaciones colectivas de carga superficial) y un fotón. La solución analítica a este problema se obtiene a través del estudio del comportamiento de una onda plana que incide desde un medio de función dieléctrica  $\epsilon_1(\omega)$  y se propaga hacia un medio  $\epsilon_2(\omega)$  (ver Figura 2.3). Las condiciones para la existencia de plasmones de superficie se derivan de la resolución de las ecuaciones de Maxwell con el propósito de encontrar soluciones homogéneas localizadas en la intercara. Una solución homogénea es un autoestado del sistema, es decir, una solución que existe sin excitación externa. Sea la ecuación de onda:

$$\nabla \times \nabla \vec{E}(\vec{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) = 0 \quad (2.1)$$

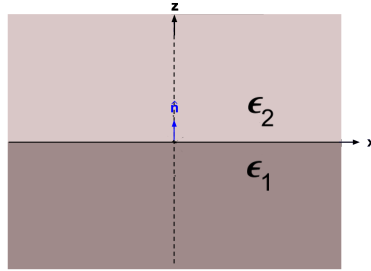


Figura 2.3: Esquema de dos medios de funciones dieléctricas  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  separados por una intercara paralela a la dirección del eje  $x$ . El vector normal a la intercara está dirigido sobre el eje  $z$ .

Esta ecuación debe resolverse para las regiones de función dieléctrica  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$ , separadas por una intercara plana, y exigir que se verifiquen las condiciones de contorno apropiadas. En primer lugar, se asume, una onda plana armónica definida por su campo eléctrico. Por simplicidad del problema, la función dieléctrica dependerá solo de una dirección. Dicho en términos más concretos, las ondas se propagan a lo largo del eje  $x$  de un sistema de coordenadas cartesianas y no presenta variación espacial en la componente  $y$ . A su vez,  $\epsilon = \epsilon(z)$ . En la intercara entre dos medios ( $z = 0$ ), la onda electromagnética puede escribirse como  $\vec{E}(x, y, z) = \vec{E}(z)e^{ik_x x}$ , en donde  $k_x$  es la constante de propagación de la onda que se corresponde con la componente del vector de onda en la dirección de propagación  $x$ .

$$\frac{\partial^2 \vec{E}(z)}{\partial z^2} + \left( \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon - k_x^2 \right) \vec{E} = 0 \quad (2.2)$$

Esta ecuación es extrapolable al campo magnético  $\vec{H}$ . Para una dependencia armónica en el tiempo ( $\partial/\partial t \Rightarrow -i\omega$ ), se obtienen el siguiente conjunto de ecuaciones acopladas para la propagación a lo largo

del eje x y un comportamiento homogéneo en el eje y, el sistema de ecuaciones anterior se simplifica a:

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x \quad \frac{\partial E_x}{\partial z} - ik_x E_z = i\omega\mu_0 H_y \quad ik_x E_y = i\omega\mu_0 H_z \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r E_x \quad \frac{\partial H_x}{\partial z} - ik_x H_z = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r E_y \quad ik_x H_y = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r E_z \quad (2.4)$$

Este sistema de ecuaciones resultante permite dos conjuntos de soluciones autoconsistentes asociadas a dos estados de polarización ortogonales entre sí. El primer conjunto de soluciones corresponde con los modos transversales magnéticos (modo TM o polarización-p, con el campo magnético de la onda incidente perpendicular al plano de incidencia) y el segundo con los modos transversales eléctricos (modo TE o polarización-s, con el campo eléctrico de la onda incidente perpendicular al plano de incidencia), tal y como se ilustra en la Figura 2.4:

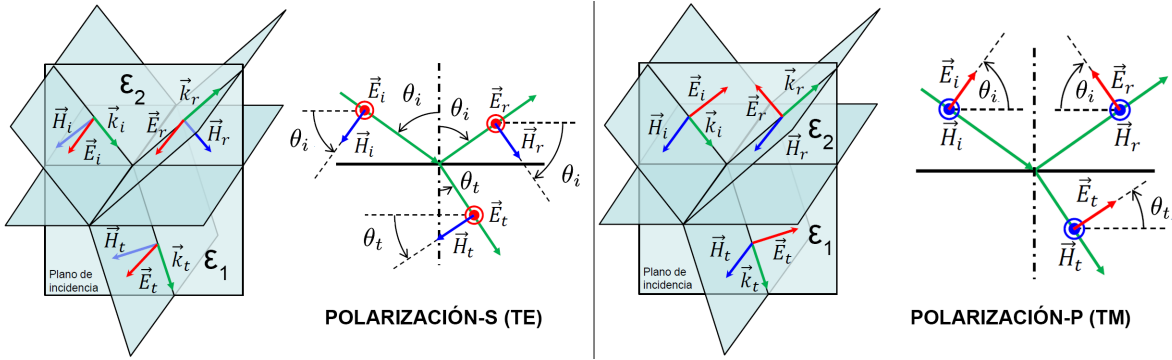


Figura 2.4: Representación del fenómeno de reflexión y transmisión de una onda plana monocromática transversal eléctrica TE (izquierda) y transversal magnética TM (derecha) entre dos medios. El medio superior está definido por  $\varepsilon_2$  y el inferior por  $\varepsilon_1$ .

Se busca, pues, las relaciones existentes entre las amplitudes de los campos eléctricos incidentes, reflejados y transmitidos de una onda tal que se cumplan las condiciones de contorno de los campos en la intercara entre dos medios para los modos TE y TM.

### Polarización-p (modos TM)

En el caso de una onda incidente transversal magnética (TM), los vectores correspondientes a los campos magnéticos son paralelos a la intercara (perpendiculares al plano de incidencia). Siguiendo un razonamiento similar al caso anterior, la continuidad de las componentes tangenciales proporciona las siguientes relaciones:

$$H_{0i} + H_{0r} = H_{0t} \quad (2.5)$$

$$E_{0i} \cos \theta_1 - E_{0r} \cos \theta_1 = E_{0t} \cos \theta_2 \quad (2.6)$$

Para la polarización-p las únicas componentes no nulas son  $E_x$ ,  $E_z$  y  $H_y$ . Las ecuaciones que gobiernan dicha configuración son:

$$E_x = -\frac{i}{\omega\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad E_z = -\frac{k_x}{\omega\varepsilon_0\varepsilon_r} H_y \quad (2.7)$$



La ecuación de onda para esta configuración es:

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + \left(\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon - k_x^2\right) H_y = 0 \quad (2.8)$$

Para una onda electromagnética armónica plana  $\vec{E}(x, y, z) = \vec{E}(z)e^{ik_x x}$ , se obtiene para las condiciones del modo TM que:

$$H_y(z) = A_2 e^{ik_x x - k_2 z} \quad E_x(z) = \frac{iA_2}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 e^{ik_x x - k_2 z} \quad E_z(z) = -\frac{A_1 k_x}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} e^{ik_x x - k_2 z} \quad (2.9)$$

Estas soluciones corresponden a la región superior a la intercara. Para la región inferior a esta:

$$H_y(z) = A_1 e^{ik_x x + k_1 z} \quad E_x(z) = -\frac{iA_1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 e^{ik_x x + k_1 z} \quad E_z(z) = -\frac{A_1 k_x}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} e^{ik_x x + k_1 z} \quad (2.10)$$

En donde  $k_i$  es la componente del vector de onda perpendicular a la intercara entre los dos medios. Su recíproco, define la longitud de decaimiento evanescente de los campos perpendiculares a la interfase.

La continuidad de  $H_y$  y  $\varepsilon_i E_z$  en la intercara conduce a dos condiciones:

$$A_1 = A_2 \quad \frac{k_2}{k_1} = -\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \quad (2.11)$$

Por lo tanto, la parte real de la función dieléctrica del medio metálico debe ser negativa,  $\Re(\varepsilon_1) < 0$ , si la función del medio dieléctrico  $\varepsilon_2$  es positiva. Es decir, las ondas superficiales se producen únicamente en la interfaz entre materiales con signo opuesto de la parte real de sus funciones dieléctricas. La expresión para el campo magnético debe satisfacer la ecuación de ondas, por consiguiente:

$$k_1^2 = k_x^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1 \quad k_2^2 = k_x^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_2 \quad (2.12)$$

Con estas relaciones y las condiciones anteriores, la relación de dispersión de los plasmones de superficie que se propagan a lo largo de una intercara entre dos medios materiales resulta:

$$k_x = \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} \frac{\omega}{c} \quad (2.13)$$

Esta expresión es válida tanto para medios materiales con y sin atenuación, es decir, tanto para valores reales como complejos de la función eléctrica. Por tanto, para que se produzcan ondas en superficie, la relación de dispersión para  $k_x$  debe tomar valores reales en la intercara. Dicha condición se verifica si tanto la suma como el producto de las funciones dieléctricas son negativos:

$$\varepsilon_1(\omega) \cdot \varepsilon_2(\omega) < 0 \quad (2.14)$$

$$\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) < 0 \quad (2.15)$$

## Polarización-s (modos TE)

En este caso, los vectores correspondientes a los campos eléctricos son paralelos a la intercara (perpendiculares al plano de incidencia). El campo magnético está dirigido de forma que el vector de Poynting apunte en la dirección del vector de onda  $\vec{k}$ . La continuidad de la componente tangencial en la interfase requiere que:

$$E_{0i} + E_{0r} = E_{0t} \quad (2.16)$$

$$-H_{0i} \cos \theta_1 + H_{0r} \cos \theta_1 = -H_{0t} \cos \theta_2 \quad (2.17)$$

Para esta configuración las únicas componentes no nulas son  $H_x$ ,  $H_z$  y  $E_y$ . Las ecuaciones que gobiernan dicha configuración son:

$$H_x = \frac{i}{\omega \mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial z} \quad E_z = \frac{k_x}{\omega \mu_0} E_y \quad (2.18)$$

La ecuación de onda para esta configuración es:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + \left( \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon - k_x^2 \right) E_y = 0 \quad (2.19)$$

Para la onda resultante de esta ecuación, siguiendo el mismo procedimiento que en el caso anterior, la continuidad de  $E_y$  y  $H_x$  en la interfaz resulta:

$$A_1(k_1 + k_2) = 0 \quad (2.20)$$

Dado que el vector de onda en la superficie tiene parte real positiva, esta condición solo se verifica en caso de que  $A_1 = 0$ , por lo que  $A_1 = A_2 = 0$ . En conclusión, la excitación de plasmones SPP solo se produce para modos de polarización TM.

### 2.1.3 Función dieléctrica en metales

Las condiciones encontradas para los materiales que forman la intercara para la excitación SPP (únicamente para los modos TM) son muy restrictivas para sus funciones dieléctricas, las cuales deben cumplir que si uno de los medios tiene una parte real de su función dieléctrica negativa, la correspondiente al otro medio deberá ser positiva. Esta condición se cumple en general para intercaras metal dieléctrico en un rango estrecho de longitudes de onda. En la Figura 2.5 se muestran los valores experimentales de las funciones dieléctricas del oro y la plata, utilizados típicamente en plasmónica. La principal característica en estos metales es que la parte real de su función dieléctrica es negativa y su valor absoluto crece al aumentar la longitud de onda considerada. Esta propiedad resulta fundamental para la excitación de plasmones de superficie. Esta respuesta dieléctrica, típica de los metales, queda descrita de forma cualitativa con el modelo de Drude [24].

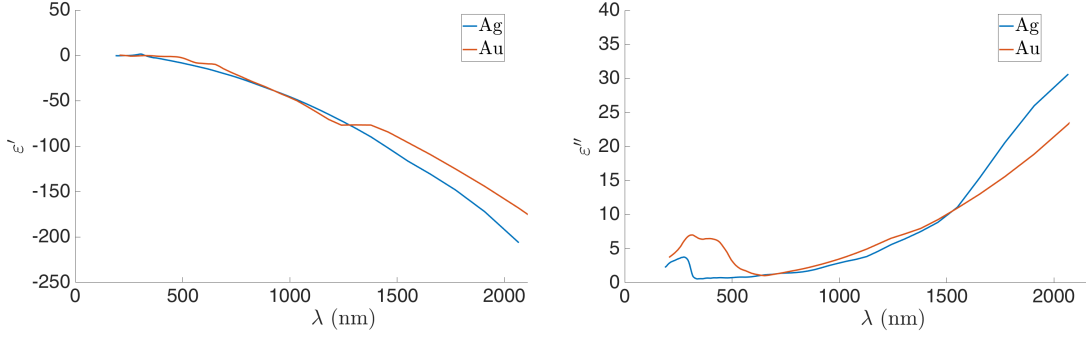


Figura 2.5: Comparativa entre la parte real y la parte imaginaria para la plata (Ag) y el oro (Au). Los datos representados para estos metales se han obtenido a partir de los valores experimentales de la referencia [25].

### 2.1.4 Características de SPPs en intercaras metal-dieléctrico

En este apartado se van a describir las características principales de los plasmones SPP que se pueden excitar en una intercara metal-dieléctrico como son su longitud de penetración, energía para su excitación, así como su distancia de propagación.

#### Vector de onda

Consideremos, por cuestiones de simplicidad, que el medio incidente es un dieléctrico con función dieléctrica  $\epsilon_d$  positiva y real. Por otro lado, el metal se va a caracterizar por una función dieléctrica compleja

$$\epsilon_m = \epsilon'_m + i\epsilon''_m \quad (2.21)$$

Donde la parte imaginaria  $\epsilon''_m$  da cuenta de las pérdidas asociadas con la dispersión electrónica en la superficie del metal (pérdidas óhmicas). El vector de onda en la dirección de propagación (2.13) es un número complejo  $k_x = k'_x + ik''_x$ , cuya parte real  $k'_x$  determina la longitud de onda del plasmón de superficie, mientras que la parte imaginaria  $k''_x$  da cuenta del amortiguamiento que experimenta a medida que se propaga en la interfaz. Si se asume que el módulo de la parte imaginaria de la función dieléctrica del metal es mucho menor que la parte real (como ocurre para el oro y la plata entre los 500 y 1000 nm), es decir,  $|\epsilon''_m| \ll |\epsilon'_m|$ :

$$k_{SPP} = k_x = k'_x + ik''_x \cong \sqrt{\frac{\epsilon'_m \epsilon_d}{\epsilon'_m + \epsilon_d}} \frac{\omega}{c} + i \sqrt{\frac{\epsilon'_m \epsilon_d}{\epsilon'_m + \epsilon_d}} \frac{\epsilon''_m \epsilon_d}{2\epsilon'_m(\epsilon'_m + \epsilon_d)} \frac{\omega}{c} \quad (2.22)$$

Esta ecuación se denomina relación de dispersión del plasmón SPP, en virtud de la cual, la longitud de onda del plasmón de superficie viene dada por:

$$\lambda_{SPP} = \frac{2\pi}{k'_x} \cong \sqrt{\frac{\epsilon'_m + \epsilon_d}{\epsilon'_m \epsilon_d}} \lambda_0 \quad (2.23)$$

Donde  $\lambda_0$  es la longitud de onda de la fuente de luz empleada en el vacío ( $2\pi c/\omega$ ).

## Distancia de propagación

La distancia de propagación del plasmón vendrá dada por la parte imaginaria del vector de onda  $k''_x$ , siendo ésta responsable de la atenuación exponencial (amortiguamiento óhmico) de la amplitud del campo eléctrico en la dirección de propagación del plasmón. En efecto, esta decae a una fracción de  $1/e$  de su amplitud inicial para  $1/k''_x$ , o lo que es lo mismo:

$$L = \frac{1}{2k''_x} = \frac{c}{\omega} \frac{\varepsilon'_m(\varepsilon'_m + \varepsilon_d)}{\varepsilon''_m \varepsilon_d} \sqrt{\frac{\varepsilon'_m + \varepsilon_d}{\varepsilon'_m \varepsilon_d}} \quad (2.24)$$

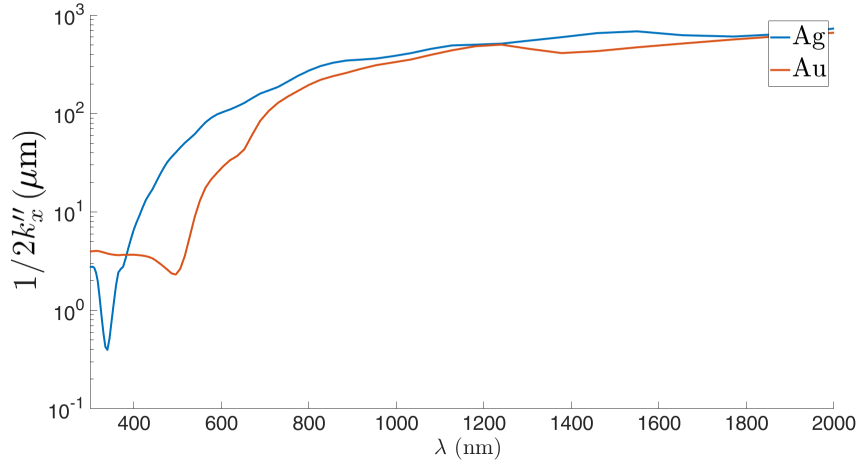


Figura 2.6: Distancia de propagación de los plasmones de superficie a distintas longitudes de onda a lo largo de la intercara.

En la expresión (2.24) del vector de onda del plasmón de superficie se observa que la parte imaginaria de la función dieléctrica del metal  $\varepsilon''_m$  es la que proporciona una componente imaginaria en el vector de onda del plasmón SPP. Debido a la absorción del medio metálico, la distancia de propagación de los modos plasmónicos en una interfase metal-dieléctrico es pequeña (en la práctica se extienden hasta las decenas de micras). Por citar unos casos ampliamente empleados en la literatura al respecto, en el caso de un sistema oro-agua o plata-agua, la distancia de propagación del plasmón de superficie en el visible varía entre algunas decenas y 200 micras, como se ilustra en la Figura 2.6.

## Longitud de penetración

La penetración de los campos en los materiales que rodean la intercara, esto es, el metal y el dieléctrico, se obtiene de la expresión del vector de onda del plasmón de superficie (2.22). Considerando la dirección perpendicular al plano en el cual se propaga el plasmón de superficie, la relación entre el vector de onda total y esta componente perpendicular que da cuenta de la penetración es:

$$\varepsilon_d k_0^2 = k_{SPP}^2 + k_{z,d}^2 \quad \varepsilon_m k_0^2 = k_{SPP}^2 + k_{z,m}^2 \quad (2.25)$$

El vector de onda del plasmón de superficie-polaritón se encuentra en el plano del vector de onda. Este siempre excede el vector de onda de un fotón propagándose por un medio dieléctrico, esto es,  $k_{SPP} > \varepsilon_d k_0^2$ , por lo que la componente  $z$  del vector de onda en ambos medios toma valores imaginarios, por ello, se produce una caída exponencial de los campos con la distancia de la intercara en ambos medios. Al combinar (2.25) con la parte real de la relación de dispersión (2.22), se obtiene la profundidad de penetración de los campos en el dieléctrico,  $\delta_d$ , y en el metal,  $\delta_m$ :

$$\delta_d = \frac{1}{k_{z,d}} = \frac{1}{k_0} \left| \frac{\varepsilon'_m + \varepsilon_d}{\varepsilon_d^2} \right|^{1/2} \quad (2.26)$$

$$\delta_m = \frac{1}{k_{z,m}} = \frac{1}{k_0} \left| \frac{\varepsilon'_m + \varepsilon_d}{\varepsilon_m'^2} \right|^{1/2} \quad (2.27)$$

A modo de ejemplo, la Figura 2.7 muestra la longitud de penetración de un plasmón SPP en el metal y el dieléctrico para intercargas oro/agua y plata/agua en función de la longitud de onda de excitación.

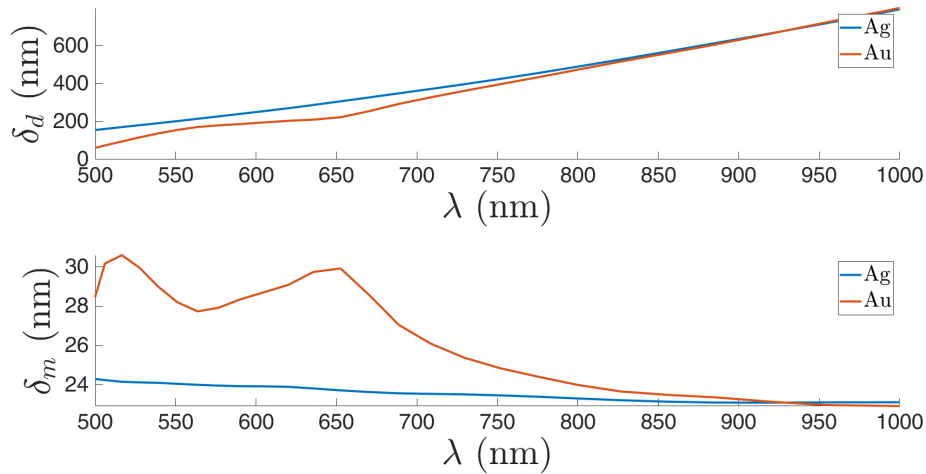


Figura 2.7: Longitud de penetración de un SPP en dieléctrico ( $\delta_d$ ) y en metal ( $\delta_m$ ) como función de la longitud de onda de excitación. En el cálculo, se tomó una solución acuosa como medio dieléctrico  $n_d=1.33$  y como metales plata y oro.

### 2.1.5 Relación de dispersión y condición de excitación

Como se ha introducido en el último apartado, la ecuación (2.22) recibe la denominación de relación de dispersión, y básicamente relaciona la longitud de onda del modo SPP con su energía. En la figura 2.8 se incluyen la relación de dispersión típica de plasmones de superficie junto con la de la onda plana en el vacío o en un medio dieléctrico. Debe hacerse notar que para que se produzca de forma eficiente la excitación de plasmones de superficie, debe producirse una transferencia de momento lineal del fotón al plasmón, a través de la transferencia del vector de onda correspondiente.

Por consiguiente, los plasmones de superficie no pueden excitarse mediante iluminación de luz directa a la superficie del metal desde el vacío (o aire), ya que no se satisface la conservación de la energía y el momento para  $\omega_{luz} = \omega_{SPP}$  y  $k_{luz} = k_{SPP}$ . Sin embargo, si el medio incidente es un dieléctrico caracterizado por su función dieléctrica  $n_d = \sqrt{\varepsilon_d}$  la relación de dispersión de este fotón será la recta  $\omega = ck_x/n_d$ , de manera que existirá una condición en la que se produzca el corte con la curva de dispersión del plasmón de superficie, permitiendo a esa energía la excitación del plasmón de forma resonante.

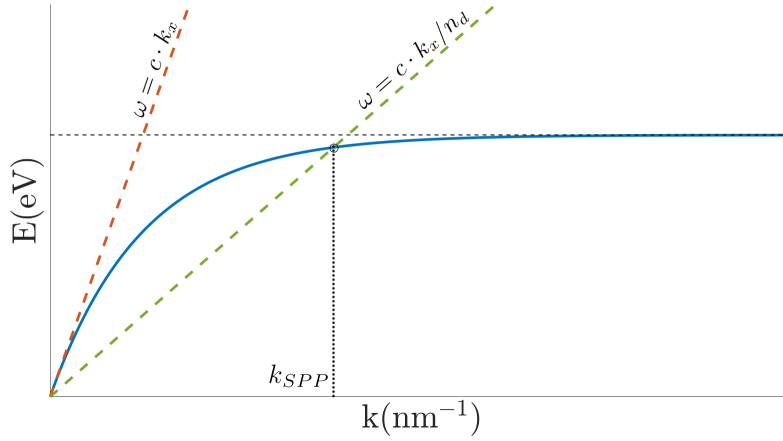


Figura 2.8: Relación de dispersión del plasmón SPP (línea continua azul), de la luz en vacío (línea discontinua roja) y en un dieléctrico de índice de refracción  $n_d$  (línea discontinua verde). La línea discontinua horizontal indica el límite asintótico de la relación de la relación de dispersión para el SPP. La intersección de la relación de dispersión de la luz en el dieléctrico con la curva de dispersión del SPP se corresponde con la condición de excitación resonante del plasmón de superficie.

En este punto hay que hacer notar que dada la dependencia con la parte real de la función dieléctrica de la componente paralela del vector de onda  $k_{SPP}$ , en la práctica no es posible excitar los plasmones directamente desde el dieléctrico, dado que en general  $k_d < k_{SPP}$ . Este escenario solo sería posible cuando la proyección paralela a la superficie del vector de onda incidente fuese igual al vector de onda del plasmón SPP:

$$k_0 n_d \sin \theta_i = k_{SPP} = \sqrt{\frac{\varepsilon'_m \varepsilon_d}{\varepsilon'_m + \varepsilon_d}} \frac{\omega}{c} \quad (2.28)$$

Dado que en general  $|\varepsilon'_m| \gg |\varepsilon_d|$ , esto solo va a lograrse en condición de incidencia rasante, lo cual en la práctica no es posible realizar. En su lugar, para excitar plasmones SPP se consideran configuraciones alternativas para excitar estos plasmones. Una de estas configuraciones es la configuración Krestchman, base de muchos sensores plasmónicos, la cual se describe en el siguiente apartado.

### 2.1.6 Excitación SPP mediante reflexión interna total frustrada

Una condición necesaria para la excitación de plasmones de superficie es que la componente paralela a la superficie del vector de onda de la luz incidente coincida con la del correspondiente del plasmón de superficie. Existen varias estrategias experimentales para excitar plasmones de superficie mediante ondas planas, tales como la configuración Otto [19], la configuración Kretschmann [20], así como con el uso de redes de difracción. A continuación, se detalla la configuración Kretschmann.

En 1971, Kretschmann [20] desarrolló un método para una nueva familia de sensores basados en la excitación de plasmones de superficie, muy utilizado en la actualidad y que se ilustra de forma esquemática en la Figura 2.9. Se trata de considerar una fina capa de metal (normalmente oro) sobre un prisma de vidrio, sobre el que se hace incidir luz, tal y como se muestra en la figura. El medio sensed, frecuentemente disoluciones acuosas de función dieléctrica  $\epsilon_d$  en aplicaciones de sensores plasmónicos biológicos, se encuentra en contacto, por encima, sobre la capa metálica. La incidencia de luz se realiza de tal manera que, sin la presencia del metal, se operase bajo condiciones de reflexión total. Para cierta polarización de la onda plana, longitud de onda y ángulo de incidencia, la condición de reflexión total podrá frustrarse, debido a la excitación de plasmones SPP en las intercaras metal-dieléctrico. Para excitar un plasmón de superficie en la intercara metal-dieléctrico, la onda evanescente creada en la intercara vidrio-metal tiene que atravesar la capa metálica. En esta configuración, si la capa de metal es demasiado fina, el plasmón obtenido no resulta eficiente para el sentido. Por el contrario, si la lámina es demasiado gruesa, no se consigue excitar plasmones de superficie debido a la fuerte absorción del metal.

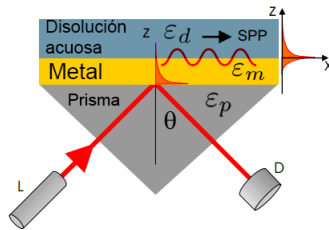


Figura 2.9: Esquema de la configuración Kretschmann, base de las plataformas de sentido plasmónicas.

La resonancia de plasmones de superficie en esta configuración se pone de manifiesto como un mínimo en la curva de reflectancia en función del ángulo de incidencia (notar que al variar el ángulo de incidencia, varía la componente paralela del detector de onda de la luz incidente). Este mínimo, responde a la conversión de fotones incidentes en plasmones de superficie que llevan la energía a lo largo de la intercara metal-dieléctrico.

En la configuración Kretschmann, la excitación de plasmones de superficie se caracteriza por emplear un prisma con una constante dieléctrica  $\varepsilon_p > \varepsilon_d$ , para así aumentar el valor del vector de onda de la luz incidente hasta poder igualar el valor del vector de onda del plasmón de superficie. En estas condiciones, a través del ángulo de incidencia y/o la energía de la luz incidente se logra sintonizar la excitación del plasmón resonante en la interfaz metal-dieléctrico. Dependiendo de si dicha sintonización se realiza atendiendo al ángulo de incidencia de la luz o con su longitud de onda, se habla de sintonizar con resonancia angular o espectral. En el caso del acoplamiento mediante un prisma, la componente paralela del vector de ondas de la luz vendrá dada por:

$$k_{x,luz} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\varepsilon_p} \sin \theta \cong k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \quad (2.29)$$

Luego el vector de onda, o el ángulo, para el que se produzca el plasmón de superficie estará estrechamente vinculado a variaciones de la función dieléctrica del medio.

Las figuras 2.10 y 2.11 sirven para ilustrar el principio de funcionamiento de los sensores plasmónicos. En concreto, la Figura 2.10 muestra el esquema de la reflectancia para una fuente de luz a 800 nm en función del ángulo de incidencia, y la Figura 2.11 ilustra la reflectancia para un ángulo de incidencia fijo de  $65^\circ$  en función de la longitud de onda empleada, en ambos casos con luz incidente en polarización-p (TM) en geometría Kretschmann para un sistema formado por un prisma de vidrio ( $n=1.55$ ), una lámina de oro de 50 nm y una disolución acuosa de índice de refracción variable. En la Figura 2.10, se incluye además la reflectancia del sistema para polarización-s (TE).

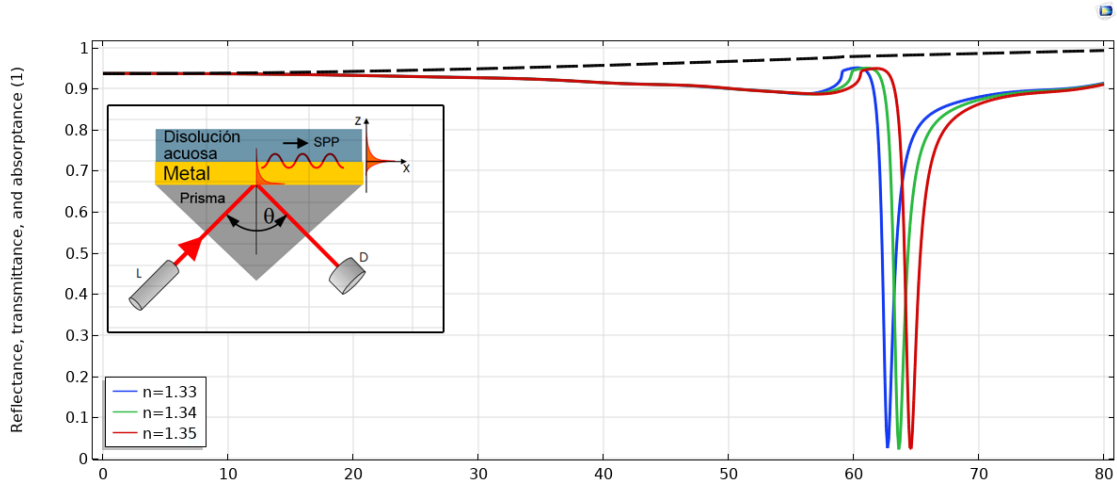


Figura 2.10: Reflectancia en geometría para luz incidente de 800 nm en geometría Kretschmann, para un sistema con un prisma de vidrio ( $n=1.55$ ), una lámina de oro de 50 nm y una disolución acuosa. Las tres curvas continuas se corresponden con las simulaciones para luz incidente en polarización-p (TM) para disoluciones caracterizadas por su índice de refracción: 1.33(azul), 1.34 (verde) y 1.35 (rojo). Los resultados para polarización-s (TE) para los distintos índices de refracción se superponen en la línea discontinua.



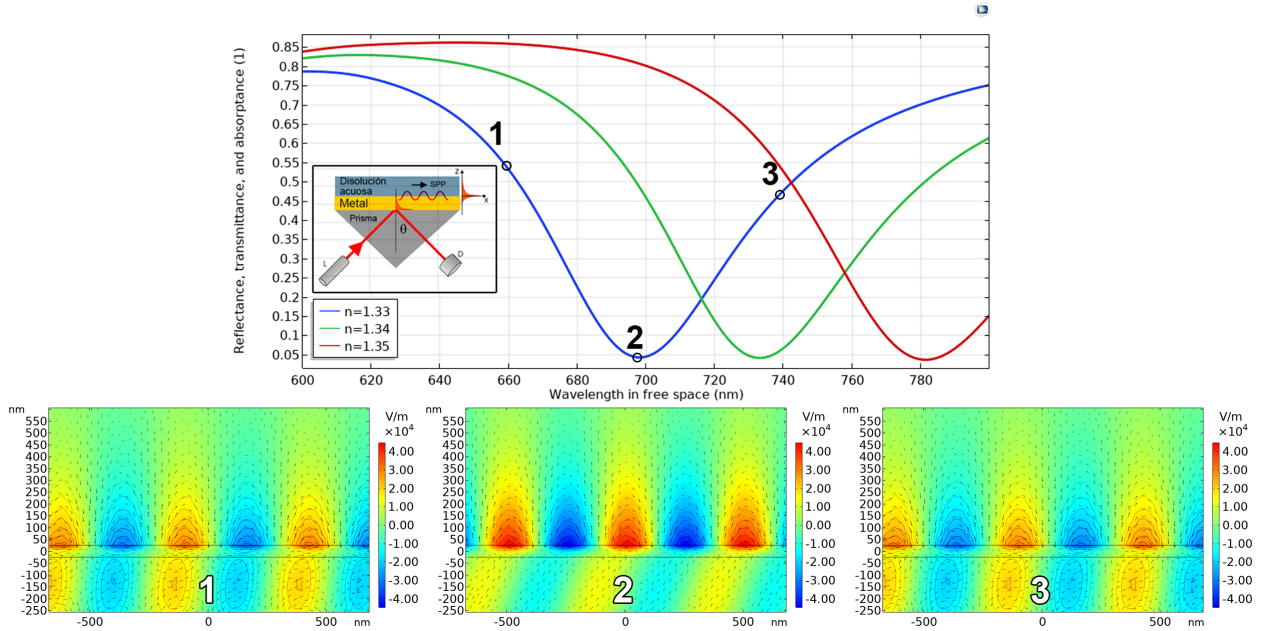


Figura 2.11: Arriba: reflectancia para ondas TM en geometría Kretschmann (prisma de cuarzo, lámina de oro de 50 nm, ángulo de incidencia  $\theta = 65^\circ$ ), para sensar disoluciones acuosas de índice de refracción variable. Se pone de manifiesto la fuerte dependencia de la posición del máximo de excitación del plasmón de superficie con la longitud de onda de la fuente empleada. Abajo: evaluación de la intensidad de campo para distintas longitudes de onda: (1) 658 nm, (2) 698 nm y (3) 738 nm. Se observa que la interacción con el medio es máxima cuando se excita los plasmones SPP de forma resonante.

En la Figura 2.10 se observa como a medida que aumenta el índice de refracción de la disolución acuosa, el mínimo en el espectro de reflectancia, debido a la absorción de energía por la excitación de los plasmones SPP, se desplaza hacia ángulos de incidencia mayores. La posición del mínimo se corresponde con la excitación resonante del plasmón de superficie. Por otro lado, en la Figura 2.11 se observa que a medida que aumenta el índice de refracción de la disolución, el mínimo de resonancia se desplaza hacia longitudes de onda mayores.

Es importante resaltar que el sensado se realiza a través de la interacción entre el campo evanescente en la intercara metal-disolución, en donde la función dieléctrica del medio juega un papel clave. Por consiguiente, la respuesta óptica que se ilustra en estas figuras solo se va a ver afectada si existen variaciones del medio en contacto con el metal, en la región delimitada por la longitud de penetración del campo evanescente del plasmón de superficie (del orden de cientos de nanómetros). Es decir, se trata de una sonda local sensible a lo que suceda solamente en las proximidades de esta intercara. Este hecho se ilustra en las evaluaciones de campo evanescente de la Figura 2.11, el cual se exalta en condiciones de excitación resonante.

Al respecto de la sensibilidad de estos sensores plasmónicos, los sencillos ejemplos ilustrados en estas figuras, muestran sensibilidades de aproximadamente  $80^\circ/\text{RIU}$  (para la Figura 2.10) y  $3000 \text{ nm}/\text{RIU}$  (para la Figura 2.11). Estas sensibilidades son suficientes para identificar la adsorción de moléculas, tales como proteínas o distintos biomarcadores presentes en enfermedades cancerígenas, en superficies de metales funcionalizadas adecuadamente. Lo descrito anteriormente constituye el fundamento de operación de muchos de los llamados biosensores plasmónicos, en los que es importante conocer la longitud de penetración para realizar el sensado local en base a la interacción del campo evanescente del plasmón SPP a pequeñas variaciones del índice de refracción de los compuestos (virus, proteínas, aminoácidos, etc) presentes en la disolución acuosa.

## Capítulo 3

# Onda superficiales de Bloch BSW

En este capítulo se presentan conceptos fundamentales relacionados con la excitación de ondas superficiales de Bloch en cristales fotónicos truncados. Asimismo, se describe una plataforma basada en éstas para el sensado de moléculas quirales en disolución. Dada la complejidad de las estructuras multicapa utilizadas, las soluciones analíticas al problema planteado son difíciles de obtener, con lo que en este caso la evaluación directa de la respuesta fotónica mediante método de elementos finitos resulta muy interesante para ilustrar la fenomenología correspondiente. Las distintas evaluaciones que se muestran en este capítulo se han realizado mediante un estudio en frecuencia mediante el método de elementos finitos en combinación con el método de transferencia de matrices y condiciones de contorno periódicas de Floquet, a través del módulo WaveOptics de COMSOL Multiphysics.

### 3.1 Ondas BSW en cristales fotónicos truncados

Un cristal fotónico es un material estructurado de manera que su función dieléctrica varía periódicamente en el espacio. Su característica principal es que condicionan la propagación de ondas electromagnéticas de un modo similar al que la periodicidad de un cristal semiconductor afecta al movimiento de los electrones. Así, los cristales fotónicos presentan bandas de energía permitidas y prohibidas para la propagación de ondas electromagnéticas de ciertas longitudes de onda, estas últimas denominadas (PGB, del inglés photonic band gap). Dependiendo de si la estructuración es en una, dos o tres dimensiones, se habla de cristales fotónicos 1D, 2D o 3D (ver Figura 3.1). Más concretamente, los cristales fotónicos 1D (1DPC), también conocidos como espejos de Bragg, consisten en apilamientos regulares de capas dieléctricas con variación periódica del índice de refracción en una única dimensión. Estas estructuras presentan una banda de reflexión (banda prohibida) para un rango de energía para las ondas planas electromagnéticas que se hagan incidir sobre ella.

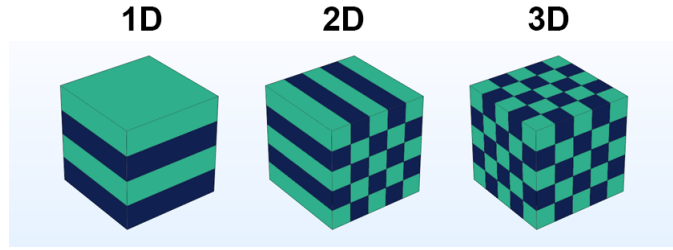


Figura 3.1: De izquierda a derecha: cristal fónico 1D, cristal fotónico 2D y cristal fotónico 3D. Cada color indica un material con una función dieléctrica distinta. Ilustración realizada con COMSOL Multiphysics.

Consideremos, bajo propósito ilustrativo, un cristal 1DPC crecido sobre vidrio ( $n_{in} = 1.55$ ) formado por el apilamiento de 10 capas de 100 nm de espesor cada una, alternando dos materiales transparentes de alto índice de refracción, como es el óxido de tantalio ( $n_{Ta_2O_5} = 2.06$ ), y otro de bajo índice de refracción, como el óxido de silicio ( $n_{SiO_2} = 1.45$ ), como se muestra en la Figura 3.2.

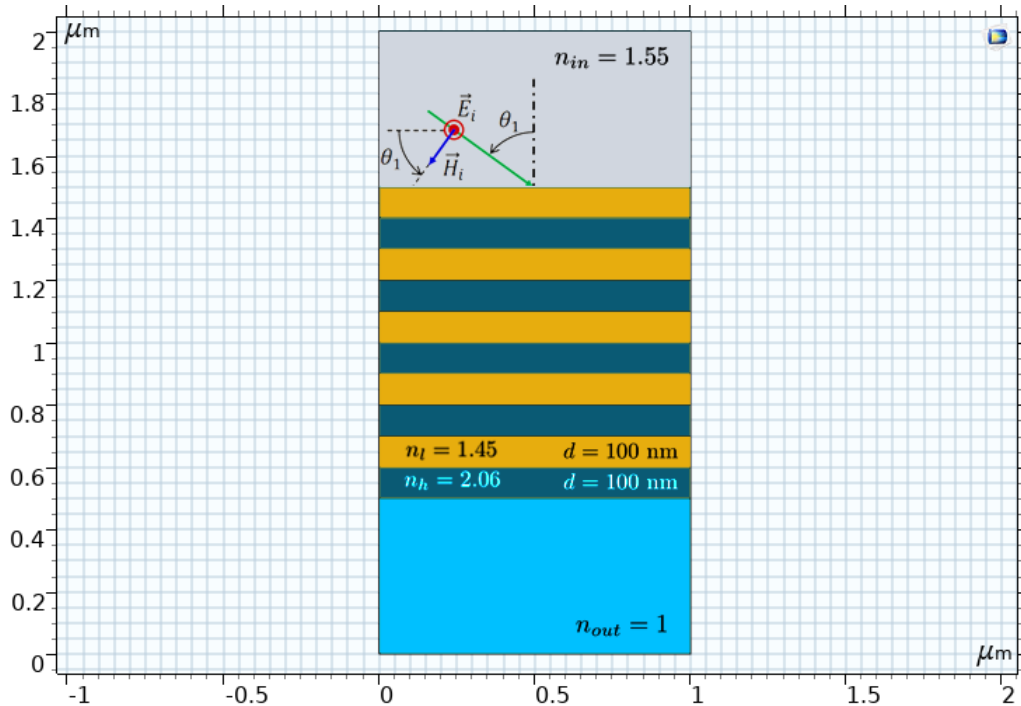


Figura 3.2: Cristal fotónico compuesto por 5 pares de capas ( $SiO_2$  y  $Ta_2O_5$ , índices de refracción y espesor indicados en la figura). La luz incide (en la figura en polarización-s) desde un medio dieléctrico con índice de refracción  $n_{in} = 1.55$  y emerge del cristal fotónico a un medio con índice de refracción  $n_{out} = 1$ .

Si hacemos incidir luz visible sobre este 1DPC, directamente sobre la multicapa (desde aire,  $n_{in} = 1.00$ ) para distintos ángulos de incidencia, los mapas de reflectancia que se encuentran, dependiendo del estado de polarización de la luz TE o TM (campo eléctrico o magnético incidente perpendicular al plano de incidencia, respectivamente), se muestran en la Figura 3.3.

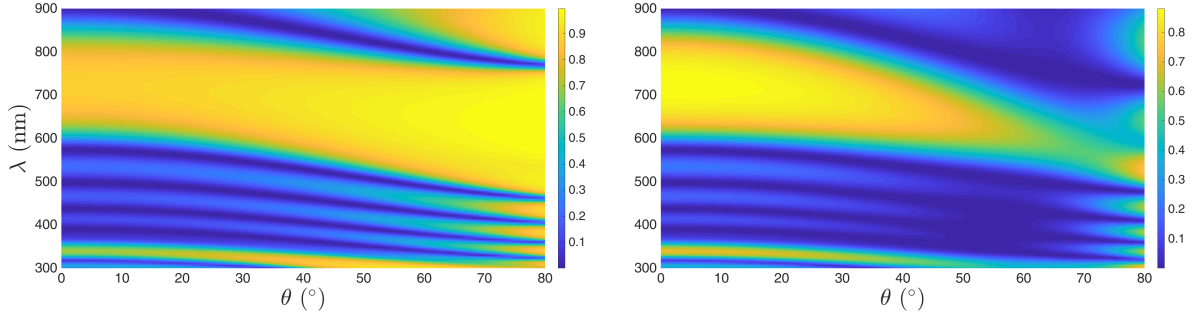


Figura 3.3: Mapa de reflectancia 1DPC de la figura 3.2 con incidencia desde vacío  $n_{in} = 1.00$ , para distintas longitudes de onda y ángulos de incidencia. A la izquierda para polarización-s (TE) y a la derecha para polarización-p (TM).

En la Figura 3.3 se muestra que, con independencia de la polarización de la onda, el 1DPC presenta una banda prohibida de longitudes de onda, en este caso entre 600 y 800 nm, que se manifiesta con valores altos de reflectancia en este intervalo. La anchura de esta banda prohibida se puede ajustar a través del contraste de índice de refracción de las capas de bajo y alto índice. Por otro lado se observa que la banda prohibida se desplaza (dispersa) hacia mayores energías (menores longitudes de onda) al aumentar el ángulo de incidencia de la luz. Asimismo se observa que los detalles de la respuesta del cristal fotónico dependen de la polarización del haz incidente.

Para el caso en que la incidencia se haga desde el vidrio, la situación es diferente (ver figura 3.4). Además de la banda de alta reflexión, a partir de un ángulo crítico determinado ( $40^\circ$ ), aparece una zona de reflexión interna total (TIR, acrónimo del inglés total internal reflection), independientemente de la longitud de onda y de la polarización de la onda incidente.

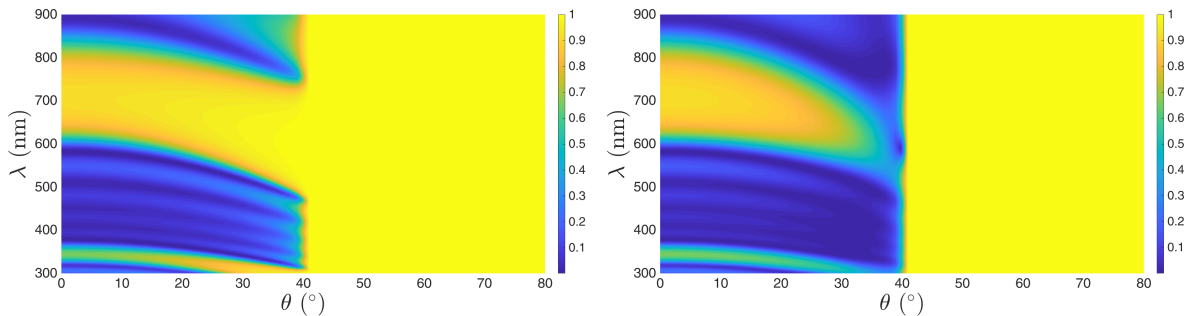


Figura 3.4: Mapa de reflectancia correspondiente a la multicapa 1DPC de la Figura 3.2, con incidencia desde de vidrio  $n_{in} = 1.55$ , para distintas longitudes de onda y ángulos de incidencia. A la izquierda para polarización-s(TE) y a la derecha para polarización-p(TM). Se aprecia la condición del ángulo crítico de incidencia para  $40.2^\circ$

La condición que fija el ángulo límite o ángulo crítico, para la reflexión total está dada por el máximo vector de onda que se puede propagar en el medio exterior:

$$k_{in} = k_0 n_{in} \sin \theta_{cri} = k_0 n_{out} \quad (3.1)$$

Esto es, la onda que emerge al medio superior se refleja por completo y se transmite rasante a la intercara de la última capa del cristal fotónico con el medio de sensado. El ángulo crítico para dicho fenómeno, se produce para:

$$\theta_{cri} = \arcsen \left( \frac{n_{out}}{n_{in}} \right) \quad (3.2)$$

Que en el caso del cristal fotónico simulado resulta  $\theta_{cri}=40.2^\circ$ , como se observa en la Figura 3.4. Para ángulos de incidencia mayores que este, se produce la reflexión total, con independencia del estado de polarización del haz incidente. El campo eléctrico en el vacío no decae de forma abrupta cuando  $k_{in} > k_0 n_{out}$ , sino que la componente perpendicular al plano del campo eléctrico (en este caso la dirección del eje  $z$ ), toma valores imaginarios, esto es, existe una componente evanescente que se atenúa exponencialmente en la dirección perpendicular al sistema multicapa. En este punto hay que hacer notar que en la región donde la banda prohibida del cristal fotónico 1D se superpone con la región de reflexión interna total, la luz sufre una doble reflexión. Este hecho singular puede explotarse para guiar la luz en la intercara truncada del cristal fotónico. Para dicho propósito se hace necesario diseñar un sistema multicapa en el que aparezca un estado defecto en la intercara entre el cristal fotónico y el medio dieléctrico sobre el que se realiza el sensado. Un defecto es una capa de diferente espesor y/o índice de refracción que altera la periodicidad del cristal fotónico, siendo esta ruptura de la condición periódica [26] la responsable de la propagación de ondas evanescentes a lo largo del mismo.

En una multicapa finita, es posible excitar con luz monocromática las llamadas ondas de superficie de Bloch (BSW, acrónimo de Bloch Surface Wave), empleando un diseño experimental basado en la configuración Kretschmann descrito en el capítulo anterior. La simetría de un cristal 1DPC en el plano  $xy$ , junto con el doble confinamiento en la dirección  $z$ , asegura la condición para el guiado de luz en la superficie del cristal fotónico truncado. El acoplamiento de la onda incidente con las ondas de superficie se realiza a partir, bien a través de las pérdidas óhmicas del cristal fotónico (debido a posibles imperfecciones de las capas que se reflejen como pequeñas absorciones en la parte imaginaria de su función dieléctrica), bien a través de la posible absorción del medio en contacto con la última superficie del cristal fotónico truncado. La Figura 3.5 muestra un ejemplo de cristal fotónico truncado, formado por una estructura multicapa  $SiO_2/Ta_2O_5/SiO_2/Ta_2O_5$  con espesores de 230 y 75 nm, para las capas de  $SiO_2$  y  $Ta_2O_5$ , respectivamente, con otra estructura encima consistente en una capa de 210 nm de espesor de  $SiO_2$  que incorpora una fina capa de 9 nm de  $Ta_2O_5$ . Esta última estructura trunca la periodicidad de la multicapa inicial.

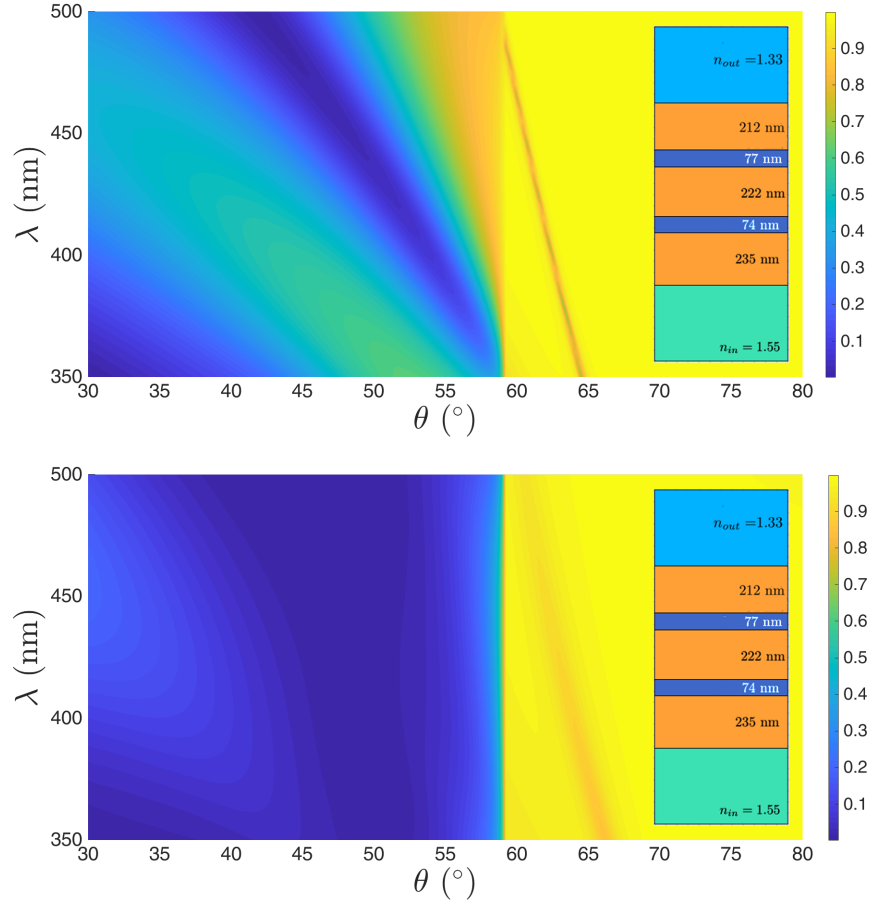


Figura 3.5: Arriba: Esquema de 1DPC truncado. Abajo: Mapa de reflectancia para distintas longitudes de onda y ángulos de incidencia obtenido en configuración Kretschmann con incidencia desde el sustrato de vidrio ( $n=1.55$ ) para sensado de medio acuoso ( $n=1.33$ ). Para luz polarizada TE y a la derecha con luz polarizada TM.

Al evaluar el mapa de reflectancia en configuración Kretschmann para varios ángulos de incidencia en función de la longitud de onda (Figura 3.5), la reflectancia para ángulos de incidencia mayores del ángulo crítico (es decir, más allá de la condición de reflexión total interna) presenta un mínimo estrecho que se dispersa con el ángulo de incidencia, es decir, con el vector de onda de la luz incidente. Este mínimo está asociado con la transferencia de energía de la onda plana incidente a una excitación de superficie denominada onda de superficie de Bloch BSW, la cual se propaga a lo largo de la superficie del cristal fotónico truncado con un vector de onda  $k_{BSW}$  que viene dado por la expresión:

$$k_{BSW} = k_0 n_{in} \sin \theta_{BSW} \quad (3.3)$$

La primera descripción experimental de estos modos data de 1978 (Yeh, Yariv y Cho). Las ondas de Bloch en superficie son, en esencia, modos electromagnéticos que pueden acoplarse a las intercaras que conforman la estructura multicapa periódica de un cristal fotónico truncado, bajo las condiciones

de excitación que se han descrito anteriormente. En concreto, como se ilustra en las figuras 3.3, 3.4 y 3.5, los modos BSW se pueden excitar tanto con luz transversal eléctrica (TE) como transversal magnética (TM), presentando esquemas de dispersión distintos. Finalmente, mencionar que, al igual que ocurre con la excitación de plasmones SPP, en general, la excitación de ondas BSW está ligada a una exaltación del campo evanescente a través del modo excitado. La Figura 3.6 muestra la distribución del campo eléctrico en la multicapa del cristal fotónico truncado anterior, en el que se ha añadido una capa de 8.9 nm de espesor con el objetivo de exaltar el campo evanescente en la última intercara. El medio sobre el que se realiza el sensado es aire ( $n_{out} = 1.00$ ) en condiciones de excitación resonante de un modo BSW para un ángulo de incidencia  $\theta_i = 65^\circ$  y una longitud de onda incidente  $\lambda_0 = 400$  nm.

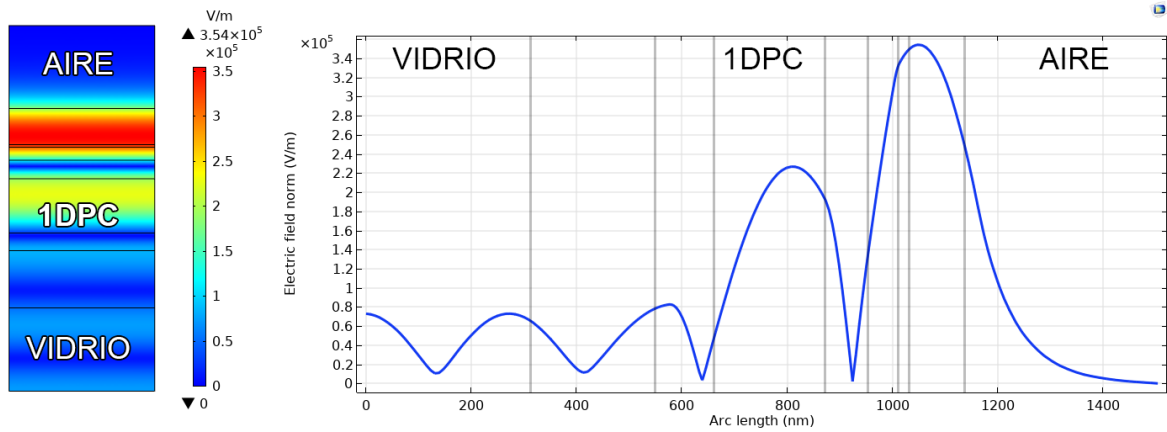


Figura 3.6: Izquierda: Distribución de la intensidad del campo eléctrico en una estructura multicapa. Derecha: Perfil de intensidad del campo eléctrico obtenido para el plano transversal al cristal fotónico  $x=0$ .

## 3.2 Comparativa con plasmones de superficie

Los modos BSW se consideran la contrapartida fotónica a los plasmones de superficie SPP. En ambos casos, si bien se trata de ondas de superficie, su naturaleza es completamente distinta. En el caso de los SPP la localización del campo en la intercara metal-dieléctrico se debe a los valores negativos de la función dieléctrica del metal para las longitudes de onda del visible, mientras que para las BSW, la localización se debe a un fenómeno de interferencia. Dado que los fenómenos subyacentes a BSW y SPP son bastante análogos, muchos de los conceptos desarrollados para estos últimos se han extendido a los modos BSW. Ambos fenómenos son descritos por el comportamiento de una onda evanescente superficial bajo las condiciones de contorno apropiadas. Para lograr su excitación, es necesario usar algún tipo de artefacto que facilite el acoplamiento entre el momento y la energía de las relaciones de dispersión de luz que los excita y la de los modos superficiales (mediante prismas, redes de difracción, guías de onda, etc.). No obstante, existen una serie de diferencias:



- Para un rango de longitudes de onda concreto, es posible seleccionar un material dieléctrico con bajas pérdidas, esto es, caracterizado por una parte imaginaria de su función dieléctrica despreciable frente a su parte real. Por ello, la distancia de propagación de las ondas de Bloch es, en general, mucho mayor que la longitud de propagación de los plasmones de superficie, ya que estas están fuertemente limitadas a la absorción del metal, como se observó en el capítulo anterior. Para bajas pérdidas, los mínimos que aparecen en los espectros de reflectancia asociados a la excitación de BSW son muy estrechos, lo cual es deseable a la hora de diseñar aplicaciones con una alta sensibilidad de detección.
- Las estructuras de los cristales fotónicos truncados pueden diseñarse de manera que se puedan excitar BSW en un rango relativamente amplio de longitudes de onda. Estas pueden ir desde el infrarrojo al ultravioleta cercano, con el fin de aprovechar el carácter transparente de los medios dieléctricos en dicho rango de longitudes de onda.
- Otra característica especialmente distintiva de BSW frente a los SPP es que las primeras admiten la excitación tanto con luz polarizada transversal eléctrica (TE) como con transversal magnética (TM).
- La posición del modo de superficie dentro de la banda prohibida puede configurarse mediante diseño de la capa superior de la estructura periódica del cristal fotónico. En general, los modos de Bloch, situados cerca del borde de la banda prohibida se presentan más localizados, lo que da lugar a campos electromagnéticos más intensos, y consecuentemente mejores capacidades de detección. Entre otras cosas, esto permite separar las contribuciones de excitación volumétricas y de superficie en una muestra, lo cual puede resultar muy atractivo para el diseño de aplicaciones de detección y sensado.

### 3.3 Sensado de moléculas quirales basado en BSW

Uno de los campos de aplicación de las ondas de Bloch en superficie más prometedores es el sensado de moléculas quirales [27] en disolución. La naturaleza de muchos constituyentes de organismos vivos (aminoácidos, proteínas, etc) presentan propiedades ligadas a su quiralidad. En este contexto, la búsqueda de nuevas técnicas para el análisis de moléculas quirales es un campo en auge. Entre las distintas aproximaciones a este propósito, las técnicas quiroópticas (fundamentalmente basadas en medidas de dicroísmo circular) ofrecen una gran flexibilidad, a un bajo coste y mediante análisis rápidos. No obstante, presentan poca sensibilidad, lo que limita su integración con sistemas microfluídicos.

La espectroscopía de dicroísmo circular (CD) emplea luz circularmente polarizada como sonda para evaluar excesos de un enantiómero determinado de una molécula quiral en una disolución, así como su configuración y conformación. Su fundamento físico reside en la diferencia en absorción para luz circularmente polarizada levógira y dextrógira de moléculas quirales. No obstante, su integración en sistemas microfluídicos se encuentra limitada por su baja sensibilidad. Más específicamente, en cubetas ópticas tradicionales (con espesores del orden de 1-10 nm) a los microcanales de las tecnologías

microfluídicas chip-on-lab (con dimensiones del orden de 10-100 micras), el recorrido óptico disponible se reduce en dos órdenes de magnitud, lo cual hace que la sensibilidad estándar de las técnicas basadas en dicroísmo circular sea incapaz de analizar disoluciones en un tiempo y con fiabilidad realista.

Recientemente, han surgido diversas propuestas de plataformas basadas en los modos BSW, como solución tecnológica a este problema. Principalmente, estas plataformas pueden sustentar ondas superficiales quirales (para una longitud de onda determinada, capaces de acoplar simultáneamente modos con polarización transversal eléctrica, TE, y magnética, TM) susceptibles de interactuar con una disolución con la que estén en contacto. Por otro lado, es previsible que la exaltación del campo en superficie de estas ondas exalte, a su vez, su capacidad de sensado. Por estas dos razones, las ondas de Bloch superficiales con cierta helicidad se denominan superquirales.

Las investigaciones con respecto a este campo de aplicaciones son muy recientes. Entre estas, hay un proyecto conjunto fruto de la colaboración del Instituto de Ciencias Materiales de Sevilla (ICMS) y el Politécnico de Milán (POLIMI). En este proyecto se ha propuesto una estructura de cristal fotónico truncado como la que se muestra en la Figura 3.7.

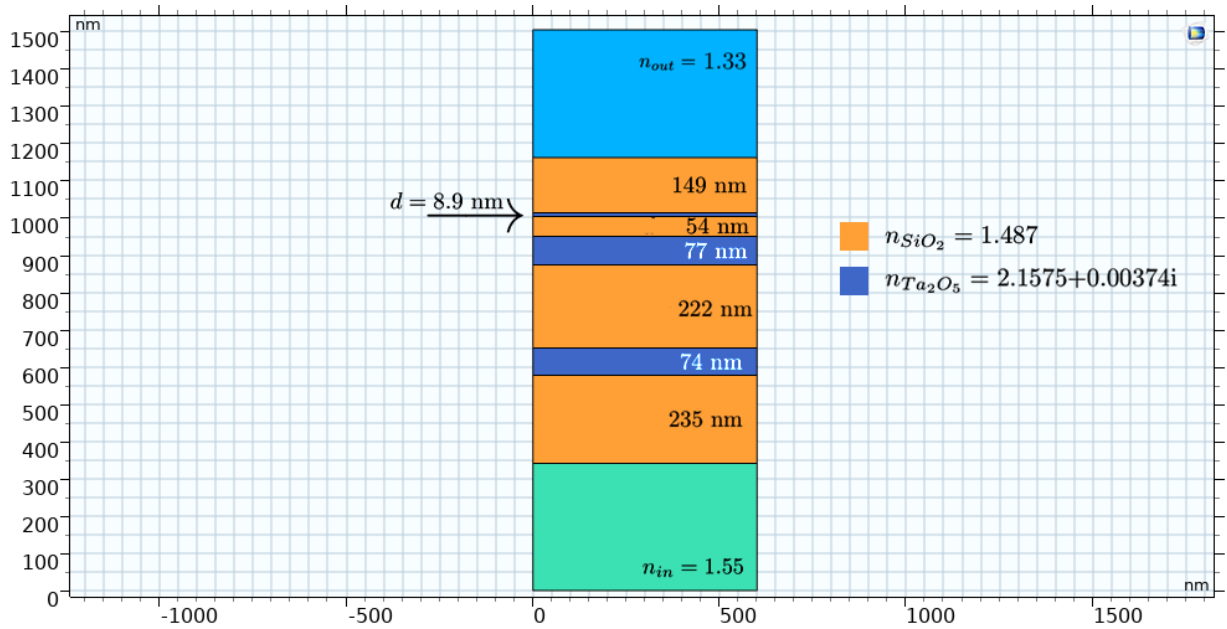


Figura 3.7: Estructura multicapa de la plataforma de sensado de moléculas quirales en disolución a través de la excitación de ondas de Bloch superquirales en superficie. Cortesía de ICMS y POLIMI.

La posición concreta de la capa estrecha de  $Ta_2O_5$  en la estructura se sintoniza para hacer coincidir la energía y vector de onda posibles de los modos TE y TM excitados en esta plataforma. Como se ilustra en las simulaciones de la Figura 3.8, al variar la posición de la capa estrecha de  $Ta_2O_5$  se consigue dispersar el modo TE, mientras que el modo TM se ve poco afectado por este parámetro.

Para una posición concreta de esta capa es posible excitar, de forma simultánea, los modos TE y TM para la estructura estudiada. Además, presentan exaltación del campo en superficie, como se aprecia en la siguiente figura.

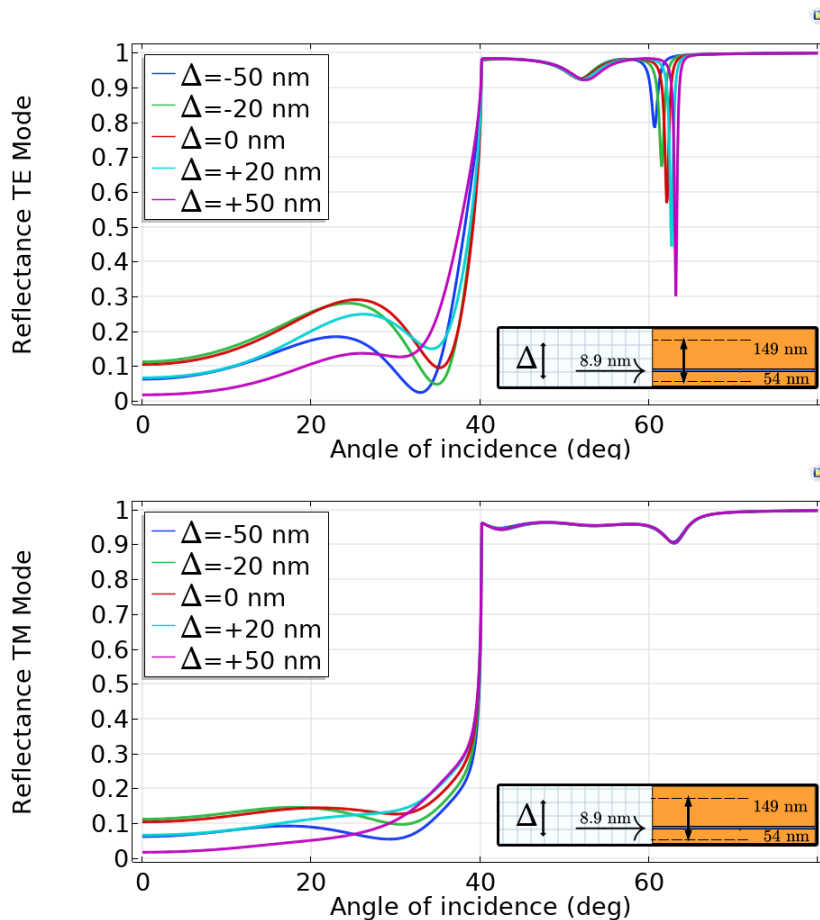


Figura 3.8: Reflexión total interna de los modos TE y TM, variando la posición de la capa defecto una distancia  $\Delta$  con respecto a la posición del diseño original.

Estas estructuras son muy prometedoras como transductores para plataformas microfluídicas de sensores de moléculas quirales en disolución. Se han fabricado en el ICMS y se han integrado en una plataforma en configuración Krestschmann para su caracterización en el POLIMI. En la Figura 3.9 se muestra la respuesta fotónica experimental TIR de los modos TE y TM y su simulación evaluada a varias longitudes de onda en función del ángulo (es decir la dispersión de los modos en función de su energía y vector de onda), poniendo de manifiesto la robustez de la metodología empleada para simular esta fenomenología, dada la proximidad de la nube de datos experimentales y las curvas correspondientes a las simulaciones, que se acentúa en torno a los mínimos de reflectancia.

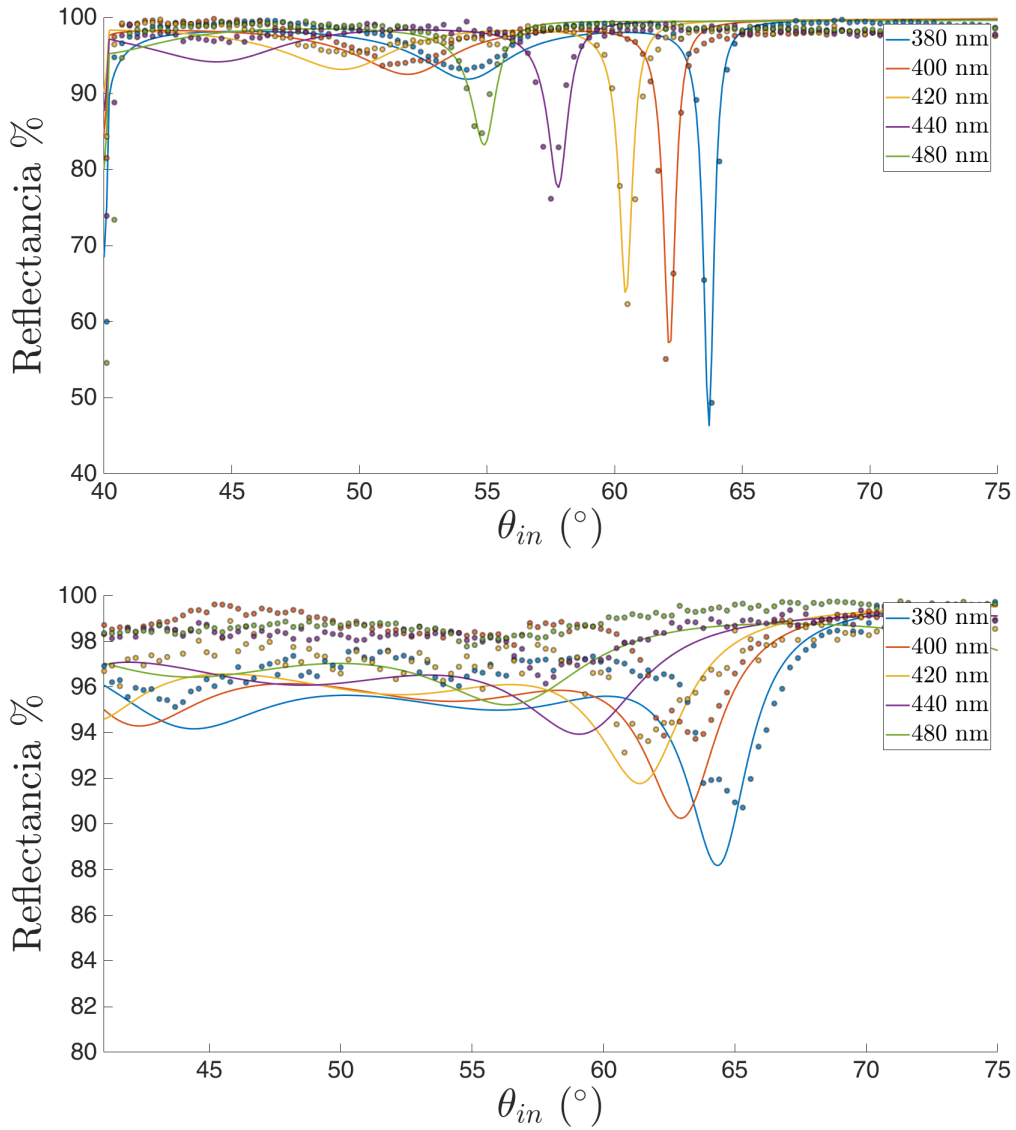


Figura 3.9: Medidas de reflectancia que muestran los modos TE (arriba) y TM (abajo) excitados en plataforma experimental fabricada en ICMS. Medidas experimentales (puntos); simulaciones (líneas continuas).

## Capítulo 4

# Excitación de modos superficiales por electrones

En este capítulo se estudian los modos de excitación plasmónicos a través del uso de electrones rápidos en una serie de estructuras laminares de complejidad creciente. Poniendo de manifiesto dos fenómenos radiativos característicos: la radiación de transición y la radiación Cherenkov. Con la ayuda de COMSOL Multiphysics, se presentan distintas configuraciones ajustables que se prestan como fuentes de radiación luminosa con el potencial para integrarse en dispositivos fotónicos.

### 4.1 Introducción

Las primeras evidencias de plasmones superficiales se obtuvieron mediante experimentos con haces de electrones en los años 50 y 60 [28, 29]. Dado que un electrón que incide en una superficie metálica opera como una fuente puntual de plasmones de superficie, el microscopio electrónico pudo abrir así vías para caracterizar los plasmones en superficie con una resolución, eso sí, limitada por el tamaño del haz de electrones. Los microscopios electrónicos actuales, ya sean microscopios electrónicos de barrido (SEM) o de transmisión (TEM), emplean de forma rutinaria haces de electrones que se enfocan a dimensiones subnanométricas. En estos sistemas, un haz de electrones ofrece una alternativa conveniente de acoplarse a los plasmones a una resolución más alta, sin sufrir las limitaciones de la microscopía óptica. Debido a los recientes avances en nanofabricación, equipos de detección y el rendimiento del instrumental de microscopía electrónica, la excitación con haces de electrones ha pasado a ocupar una posición cada vez más importante como método de caracterización de la amplia variedad de dispositivos plasmónicos a longitudes del rango visible y menores [30, 31].

## 4.2 Excitación de plasmones mediante electrones rápidos

La descripción general de la producción y propagación de fotones en medios complejos puede obtenerse de la solución de las ecuaciones de Maxwell con un término inhomogéneo, denominado fuente. Es el caso, por ejemplo, del estudio del comportamiento radiativo y la excitación de modos de superficie por electrones rápidos, con velocidades tanto no-relativistas, correspondientes a energías cinéticas menores de 100 keV, hasta ultrarrelativistas, con energías cercanas a los 1000 keV. Esta circunstancia requiere un tratamiento diferente con respecto a los estudios de excitación de modos superficiales con ondas planas descritos en los capítulos anteriores. La ecuación a resolver en este caso pasa a ser:

$$\nabla \times \nabla \vec{E}(\vec{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) = i\omega\mu_0 \vec{J}(\vec{r}) \quad (4.1)$$

Este tipo de problemas se resuelve habitualmente por el método de diferencias finitas en dominio temporal (FDTD) o método de Yee [32], ya que se erige como una técnica para el modelado computacional de problemas electrodinámicos bastante eficiente. No obstante, debido a la complejidad de las estructuras a representar y la necesidad de elección de un mallado preciso, el método de elementos finitos, núcleo fundamental de COMSOL Multiphysics, ofrece una mayor libertad para definir dominios elaborados (tales como estructuras multicapa) con mayor precisión y un tiempo de cálculo mucho menor para estructuras que el método de las diferencias finitas.

La excitación de plasmones de superficie con haces de electrones es un campo de estudio de gran relevancia [32–36]. Estos constituyen una herramienta útil con la que estudiar la relación de dispersión de nuevas estructuras plasmónicas, así como el estudio de fenómenos electromagnéticos [37, 38] tradicionalmente restringidos a aplicaciones de la física de altas energías. En este trabajo, las casuísticas que se evalúan son la excitación perpendicular y la excitación paralela de plasmones de superficie mediante electrones [39]. En los ejemplos tratados se empleó plata como estándar operativo para describir la respuesta de superficies metálicas.

### 4.2.1 Excitación perpendicular de plasmones de superficie por electrones

Consideremos un haz de electrones que incide desde el vacío sobre la superficie de un metal en incidencia normal a la superficie (ver Figura 4.1). A la hora de reproducir las excitaciones electromagnéticas producidas por un electrón, el término de fuente introducido en la ecuación (4.1) a resolver procede de la densidad de corriente ligada al electrón, concebido como una carga puntual, en movimiento rectilíneo uniforme, en la dirección normal a la superficie metálica considerada.

$$\vec{j}(\vec{r}, t)_\perp = -qv_0\delta(x)\delta(y - y_0 + v_0t)\delta(z)\vec{u}_y \quad (4.2)$$

En donde  $q$  es la carga del electrón,  $v_0$  la velocidad de dicha partícula y las deltas de Dirac hacen referencia al carácter puntual de la distribución de carga. En la práctica, el electrón en movimiento en

COMSOL se describe como una distribución gaussiana de densidad de corriente con una desviación estándar  $\sigma = 1$  nm, mucho menor que las dimensiones de los dominios físicos evaluados (del orden de las decenas de nanómetros o mayores). Debido al interés de un estudio en frecuencia, mediante la transformada de Fourier, la densidad de corriente del electrón en movimiento se introdujo en COMSOL como se indica:

$$\vec{j}(\vec{r}, \omega)_{\perp} \cong -q \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\omega(y-y_0)/v_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-z^2/2\sigma^2} \vec{u}_y \quad (4.3)$$

La densidad de corriente producida por un electrón en movimiento da lugar a campos electromagnéticos en la dirección del eje de la trayectoria de la partícula (eje  $y$ ) y en la dirección perpendicular a la misma (ejes  $x, z$ ). Dado que el problema presenta simetría de revolución con respecto a la trayectoria de la partícula, la simulación de estos campos se realizó con estudio en 2D para reducir considerablemente el tiempo de cálculo mediante elementos finitos.

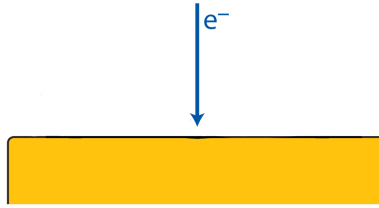


Figura 4.1: Representación esquemática de la incidencia normal de un electrón, viajando en vacío, sobre una superficie metálica.

El campo resultante de este proceso se puede expresar como la suma de una solución particular  $E'$  [40], debido al movimiento del electrón, y una solución homogénea  $E$  a la ecuación de Helmholtz (4.2). Las condiciones de contorno de este problema deben contemplar, pues, tanto la acción de los campos electromagnéticos producidos por la carga en la superficie como la onda radiada:

$$E_{x,0} + E'_{x,0} = E_{x,m} + E'_{x,m} \quad \varepsilon_0 E_{y,0} + \varepsilon_0 E'_{y,0} = \varepsilon_m E_{y,m} + \varepsilon_m E'_{y,2} \quad k'_{x,i} E'_{x,i} + k'_{y,i} = 0 \quad (4.4)$$

En donde  $\varepsilon_m$  es la función dieléctrica del metal,  $k'^2_{z,i} + k'^2_r = \varepsilon_i k^2$  donde el subíndice  $i$  hace referencia al medio pertinente y los superíndices denotan los valores correspondientes del vector de onda y los campos eléctricos adicionales. Las condiciones de contorno (4.4) están integradas dentro de los métodos del procedimiento de resolución de COMSOL Multiphysics al considerar una densidad de corriente eléctrica, por lo que basta con considerar un dominio semi-infinito en los laterales del dominio a través de PML (Perfect Matched Layers) para evitar fenómenos indeseados de reflexión en las caras laterales y superior. La ecuación resultante de considerar las expresiones (4.1), (4.3) y (4.4) para el campo eléctrico no tiene solución analítica. Sin embargo, con la ayuda del método de elementos finitos, puede obtenerse la respuesta de los campos electromagnéticos generados. La Figura 4.2 muestra la simulación de los campos inducidos en esta configuración para electrones incidentes de 50 y 500 keV.

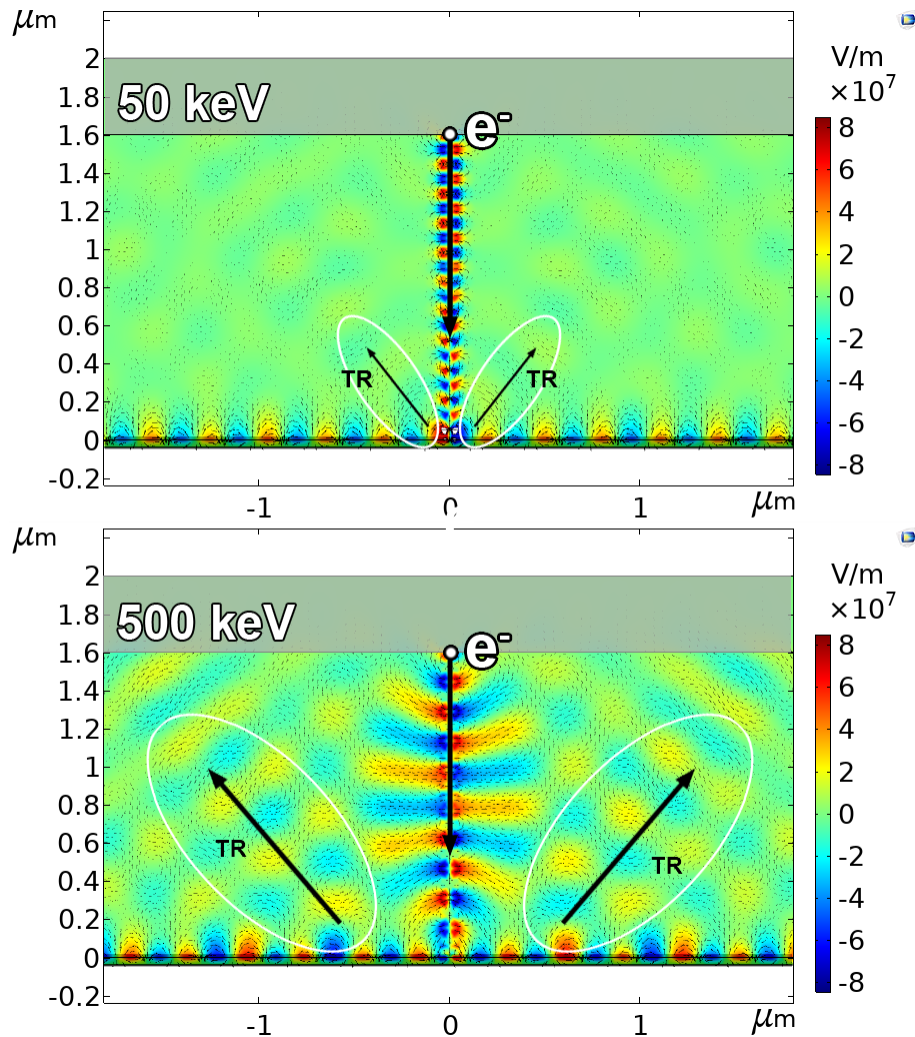


Figura 4.2: Representación esquemática de la producción simultánea de radiación de transición y excitación de plasmones de superficie por incidencia normal de un electrón sobre una superficie metálica.

Podemos observar que, independientemente de la energía del electrón, se produce la excitación de plasmones de superficie en la intercara metal-vacío. La magnitud de los campos electromagnéticos en la intercara es mayor a menor energías del electrón. Por otro lado, en el vacío tiene lugar la propagación de una onda electromagnética como consecuencia de las condiciones del problema, esto es, una onda reflejada como consecuencia de la perturbación del colectivo electrónico en la superficie mediante una partícula cargada. Este fenómeno se conoce como radiación de transición, que tiene lugar si una partícula cargada pasa a través de la intercara entre dos medios con diferentes funciones dieléctricas, debido al colapso del momento del dipolo eléctrico formado por el electrón y su carga imagen en el dieléctrico. Este efecto fue predicho por [41] por Ginzburg y Frank en 1946 y observado por Goldsmith y Jelly en metales [42]. Para metales bombardeados por electrones, la excitación de los plasmones de superficie tiene lugar cuando la perturbación que supone la carga móvil se acopla al movimiento



colectivo de electrones libres en la superficie metálica. Ritchie observó este efecto [43] en 1959, por microscopía EELS y proporcionó una primera prueba de la excitación de plasmones de superficie. En las décadas posteriores, esta técnica se ha extendido a geometrías más elaboradas [44, 45] y al estudio de nanopartículas [46]. La Figura 4.3 representa de forma esquemática la fenomenología de excitaciones producida por haces de electrones en incidencia normal a una superficie metálica.

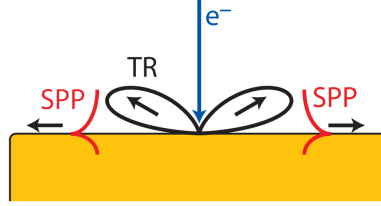


Figura 4.3: Representación esquemática de la producción simultánea de radiación de transición y excitación de plasmones de superficie por incidencia normal de un electrón sobre una superficie metálica.

#### 4.2.2 Excitación paralela de plasmones de superficie por electrones

En esta nueva configuración, el término de fuente introducido en la ecuación a resolver procede de la densidad de corriente producida por un electrón, concebido como una carga puntual, en movimiento rectilíneo uniforme, paralelo a una distancia  $y_0$  (ver Figura 4.4) a la superficie metálica considerada.

$$\vec{j}(\vec{r}, t)_{||} = qv_0\delta(x - v_0t)\delta(y - y_0)\delta(z)\vec{u}_x \quad (4.5)$$

En donde  $q$  es la carga del electrón,  $v_0$  la velocidad de dicha partícula y las distribuciones respectivas hacen referencia al carácter puntual de la misma. Nuevamente, las distribuciones delta de Dirac se implementaron como gaussianas con un parámetro de desviación estándar  $\sigma = 1$  nm. Por último, debido al interés de un estudio en frecuencia, mediante la transformada de Fourier y con la consideración anterior, la ecuación (4.5) queda como:

$$\vec{j}(\vec{r}, \omega)_{||} \cong q \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\omega(x+x_0)/v_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(y-y_0)^2/2\sigma^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-z^2/2\sigma^2} \vec{u}_x \quad (4.6)$$

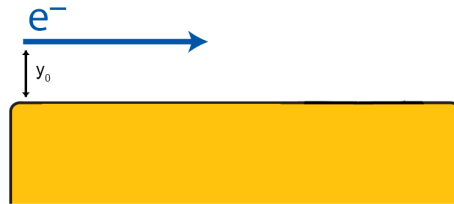


Figura 4.4: Representación esquemática de un electrón viajando paralelo a una superficie metálica (Ag) a una distancia  $y_0$ .

Para esta configuración, las condiciones de contorno para los campos electromagnéticos (es decir, condición de continuidad de la componente paralela de E en la intercara), vienen dadas por las siguientes expresiones [39]:

$$(E_{x,\text{vacío}} + E_{x,\text{haz}})|_{y=0} = E_{x,\text{metal}}|_{y=0} \quad (H_{x,\text{vacío}} + H_{x,\text{haz}})|_{y=0} = H_{x,\text{metal}}|_{y=0} \quad (4.7)$$

En este caso se puede encontrar una solución analítica al problema. Los campos generados por el haz tienen estas expresiones [47]:

$$E_z = \frac{k_x q(1 - \beta^2)}{2\epsilon_0 v_0 k_c} e^{i(k_x x + k_c |y - y_0|)} \quad H_z = \frac{\omega \epsilon_0}{k_c} E_x \quad (4.8)$$

Con  $k_x = \omega/v_0$ ,  $k_c = \sqrt{\omega^2/c^2 - k_x^2}$  y  $\beta = v_0/c$  es el parámetro de velocidad relativa. La densidad de corriente producida por electrón en movimiento da lugar a campos electromagnéticos en la dirección del eje de la trayectoria de la partícula (eje x) y en las direcciones perpendiculares a la misma. A la vista de la expresión 4.8, se obtiene que el electrón en su trayectoria genera una onda evanescente en la intercara metal-dieléctrico que decae exponencialmente en la dirección perpendicular a la superficie y que se propaga junto con el electrón. La figura 4.5 muestra varias simulaciones numéricas del mapa de intensidad de campo eléctrico al problema planteado.

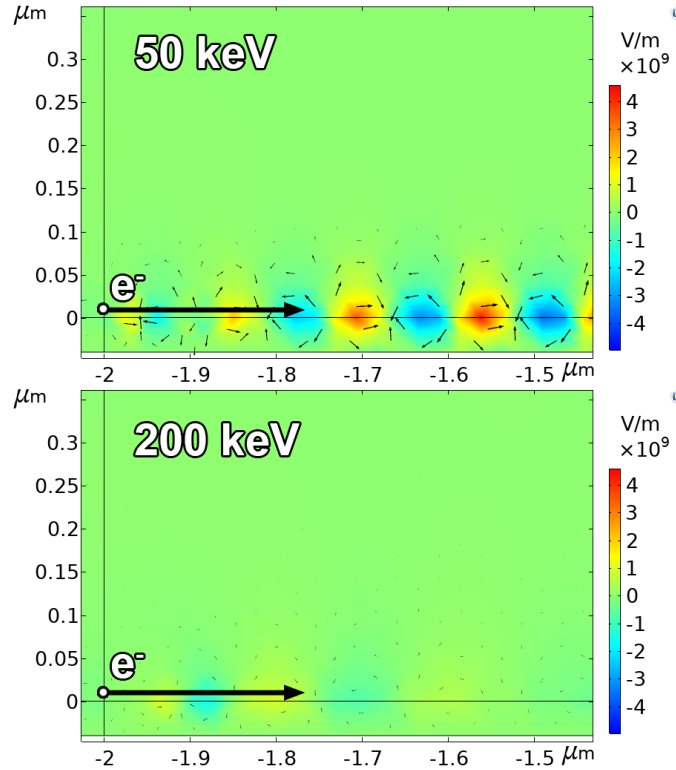


Figura 4.5: Simulaciones de campo eléctrico excitado a 345 nm (3.60 eV) producidas por electrones de 50 keV y a la misma energía con electrones de 200 keV (fuera de la condición de excitación SPP) que viajan en el vacío en una trayectoria paralela a la superficie del metal a una distancia de 10 nm.

Con el fin de poder interpretar adecuadamente los mapas de intensidad de campo eléctrico simulados en la figura 4.5 es necesario recordar que la excitación resonante de los plasmones de superficie sólo se producirá cuando se cumplan las condiciones de transferencia de momento y energía adecuadas, es decir, cuando se crucen las curvas características de las relaciones de dispersión de los haces de electrones y los plasmones de superficie. La figura 4.6 muestra una representación cualitativa de las mismas.

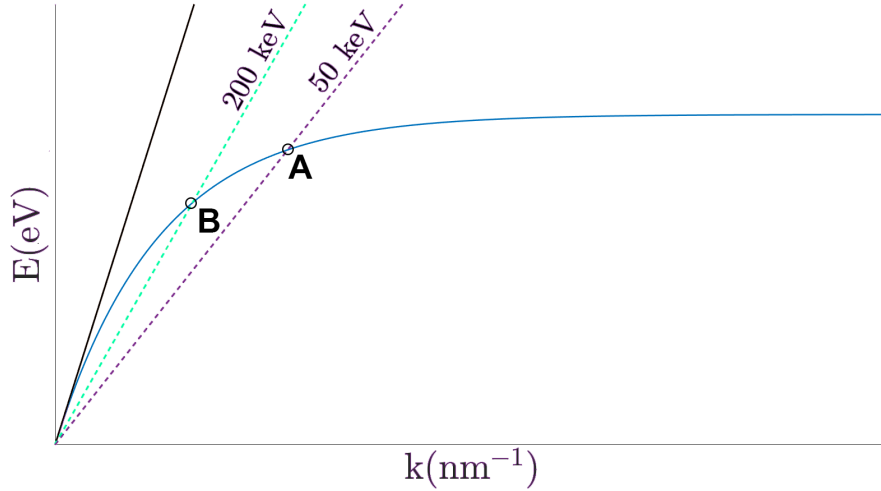


Figura 4.6: Representación cualitativa de las relaciones de dispersión correspondientes a plasmones de superficie SPP (azul) y haces de electrones de 200 keV (azul claro) y 50 keV (violeta) en trayectorias paralelas a la superficie. También se incluye la relación de dispersión de luz en el vacío (línea continua negra). La excitación resonante de los plasmones de superficie por medio de estos haces de electrones se producirá en los puntos de corte entre las respectivas relaciones de dispersión.

En esta configuración, dado que el vector de onda asociado al electrón tiene proyección en la superficie del metal, es posible representar en una misma gráfica la relación de dispersión de los plasmones de superficie y la de los electrones que sirven de excitación, cuya pendiente viene dada por la velocidad (energía cinética del haz) y se deduce de la expresión para la energía relativista:

$$E = \hbar\omega = \hbar v_0 k = \hbar \sqrt{1 - \left( \frac{1}{(E_c/m_0 c^2) + 1} \right)^2} ck \quad (4.9)$$

En donde  $\hbar$  es la constante reducida de Planck,  $E_c$  la energía cinética del haz,  $m_0 c^2$  la energía en reposo de las partículas consideradas (511 keV) para un electrón) y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. Como se ilustra en la representación de las relaciones de dispersión, la condición resonante para la excitación de los plasmones de superficie viene determinada por el denominado punto de operación, esto es, la intersección entre la relación de dispersión y la recta de dispersión correspondiente al haz de electrones. Notar que el aumento de la energía cinética del haz de electrones conduce a un punto de operación más bajo (es decir, a la excitación resonante de plasmones con menores energías).

En la figura 4.5 se puede apreciar, que en el caso de electrones de 50 keV se va a producir excitación resonante de plasmones a 345 nm, mientras que si los electrones viajan a 200 keV, dado que el corte entre las correspondientes curvas de dispersión se desplaza hacia la recta asintótica de la luz en vacío, la excitación resonante debe ocurrir a menores energías. A modo de resumen, la Figura 4.7 representa esquemáticamente las excitaciones producidas en la intercara vacío-metal por electrones que viajen en una trayectoria paralela a dicha superficie.

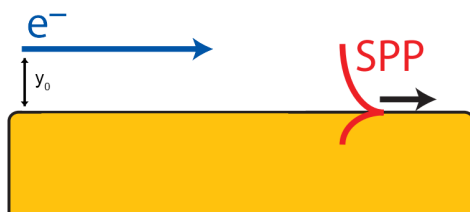


Figura 4.7: Representación esquemática de la excitación de plasmones de superficie SPP por un haz de electrones paralelo a la superficie.

En este punto hay que mencionar que esta configuración de excitación paralela de plasmones mediante haces de electrones es una primera aproximación a una nueva familia de dispositivos ópticos integrados que emplean haces de electrones como fuentes de luz para aplicaciones que tienen como objetivo trasladar el estudio de fenómenos característicos de la física de partículas y altas energías con aproximaciones experimentales típicas de la fotónica.

### 4.3 Excitación de radiación Cherenkov acoplada a SPP

En la década pasada, se produjeron avances prósperos en los campos de la electrónica, la fotónica y la nanotecnología, como sustrato fundacional para una metodología prometedora a la hora de generar radiación en el rango visible [48–50]. Entre estos estudios se puso de manifiesto el diseño para futuras aplicaciones que se vertebraran sobre los fenómenos electromagnéticos en guías de onda con estructuras periódicas nanométricas excitadas por haces de electrones. Mas aún, en similitud con la línea de este trabajo, se han establecido las bases para el futuro desarrollo de dispositivos en los que producir y sensar las propiedades de la radiación Cherenkov producida por un haz de electrones y pulsos ópticos. Motivo por el cual, aún en el estado del arte, los aceleradores de electrones que operan con estas estructuras fotónicas se postulan como principal baza para la producción de pulsos ultracortos de attosegundos y la excitación de radiación Cherenkov. Todo ello, sin olvidar, la providente aportación de las técnicas de manufactura que se han ido implementando en nanotecnología.

Todos estos estudios han propiciado el estudio, diseño de dispositivos y desarrollo de enfoques diversos para la obtención de radiación Cherenkov, tales como el control de los ángulos de radiación Cherenkov mediante cristales fotónicos con radiación de transición resonante [51], su verificación experimental en metamateriales [52] varias décadas después del planteamiento de las hipótesis de Veselago [53] y fenómenos tan exóticos como la obtención del corrimiento Doppler y la emisión de radiación Cherenkov convencional en medios con índice de refracción negativo [54].

En el presente trabajo adaptamos los resultados obtenidos por la Universidad de Ciencia y Tecnología Electrónica de China [11, 55] a distintas estructuras de medios materiales caracterizadas por los datos tabulados implementados dentro de las librerías de COMSOL Multiphysics. En concreto, se emplea un sustrato de SiC debido a su fácil crecimiento en obleas y su alto índice de refracción en la región del visible  $n_{SiC} \sim 3.2$ , junto con una lámina delgada de plata 20 nm. Posteriormente se añade una capa de 20 nm de espesor de Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> para poner de manifiesto la posibilidad de sintonizar los plasmones SPPs a una longitud de onda mayor. Para ello, dada la metodología de COMSOL Multiphysics, presentamos de forma escalable en este trabajo como se fue abordando el problema en diferentes etapas.

### 4.3.1 Descripción cualitativa de la radiación Cherenkov

El segundo postulado de la Teoría de la Relatividad Especial ha sido desde tiempo atrás objeto de fascinación y estudio en diversas líneas de investigación. No obstante, cuando el problema se traslada a medios materiales, la situación no hace sino adquirir un cariz singular. Algunos fenómenos, y en concreto el que vamos a desarrollar, como decía John Hubbell, aún proyectan una larga sombra -o luz en realidad- a lo largo de la historia y el futuro de la física de la radiación. La radiación Cherenkov debe, por tanto, abordarse desde la interdisciplinariedad que le confieren sus analogías con fenómenos físicos conocidos, el formalismo matemático y la descripción cualitativa del mismo.

Supóngase un electrón en movimiento rectilíneo uniforme a través de un medio transparente, no absorbente (parte imaginaria de la función dieléctrica nula). En la vecindad de su recorrido, el campo eléctrico de la carga en movimiento deformará las nubes electrónicas de los átomos del material, quedando el medio polarizado momentáneamente en torno a la posición del electrón en movimiento. Cuando este se desplace de una posición a otra a lo largo de su trayectoria, las nubes electrónicas recuperarán su forma original. No obstante, mientras permanezcan deformadas, actuarán como dipolos elementales orientados radialmente hacia afuera a la trayectoria del electrón. Cada región del espacio, a lo largo de la trayectoria del electrón, recibirá un breve pulso electromagnético, por lo que esta partícula actúa como una fuente puntual de frentes de ondas esféricas cuyo origen se sitúa en su posición.

Para obtener una imagen del fenómeno descrito en COMSOL Multiphysics, se implementó en una primera fase como un estudio temporal:

$$\varepsilon_r \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \nabla \times \vec{H} + \sigma \vec{E} = -\vec{J}_e \quad (4.10)$$

En donde la densidad de corriente eléctrica viene definida por el desplazamiento de un electrón en movimiento rectilíneo uniforme siguiendo la ecuación (4.5) y que se implementó como un pulso gaussiano:

$$\vec{J}_e = \frac{qv_0}{(\sqrt{2\pi}\sigma^2)^3} e^{-(x+x_0-v_0t)^2/2\sigma^2} e^{-y^2/2\sigma^2} e^{-z^2/2\sigma^2} \vec{u}_x \quad (4.11)$$

Planteándose así dos escenarios posibles:

### Bajas velocidades

A medida que el electrón se desplaza, los átomos del medio recuperarán su forma original. No obstante, mientras permanezcan deformados, actuarán como dipolos elementales orientados radialmente hacia afuera a la trayectoria del electrón. Cada región del medio, a lo largo de la misma, recibirá un breve pulso electromagnético. Las ondas radiadas interfieren destructivamente. A distancias lejanas, el campo resultante se anula y, por consiguiente, no se observan fenómenos de radiación.

### Altas velocidades

Sin embargo, si la velocidad del electrón es superior a la velocidad de la luz en dicho medio, las ondas emitidas radialmente en un punto lejano estarán en fase, produciéndose un campo resultante, observable y con un cierto ángulo con respecto a la trayectoria de la partícula. Empleando la construcción de Huygens (Figura 4.8), la condición de coherencia tiene lugar cuando el electrón recorre una distancia en el mismo tiempo que la luz viaja desde el punto inicial de la partícula cargada al resultante de la intersección de la recta tangente al frente de ondas y el segmento perpendicular a este, que pasa por el punto inicial. El ángulo bajo el que se observa este fenómeno, denominado ángulo de Cherenkov, es descrito por la siguiente expresión:

$$\cos \theta_c = \frac{1}{\beta n} \quad (4.12)$$

En donde  $\beta$  es el parámetro de velocidad relativista y  $n$  el índice de refracción del medio material transparente (en primera aproximación isotrópico, homogéneo e infinito). Por lo que este estampido electromagnético tendrá lugar cuando se verifique que:

$$\beta n > 1 \quad (4.13)$$

De estas expresiones se deduce la existencia de una velocidad umbral para la emisión de radiación Cherenkov ( $\beta_{\min} = 1/n$ ) y un ángulo máximo  $\theta_{c,\max} = \arccos(1/n)$ , para  $n$  constante.

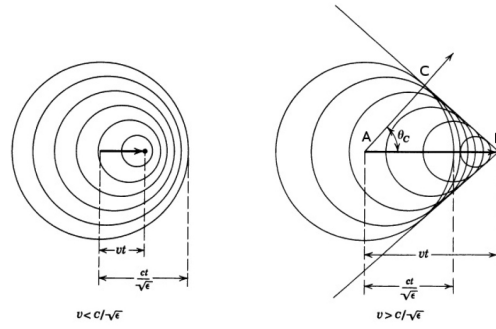


Figura 4.8: Construcción de Huygens en un medio dieléctrico ante el paso de una partícula cargada. A la izquierda, la radiación emitida en cada punto interfiere destructivamente y no se aprecia en distancias lejanas. A la derecha, la radiación emitida interfiere constructivamente en cada punto a lo largo de la trayectoria, creándose un frente de ondas (onda de choque).

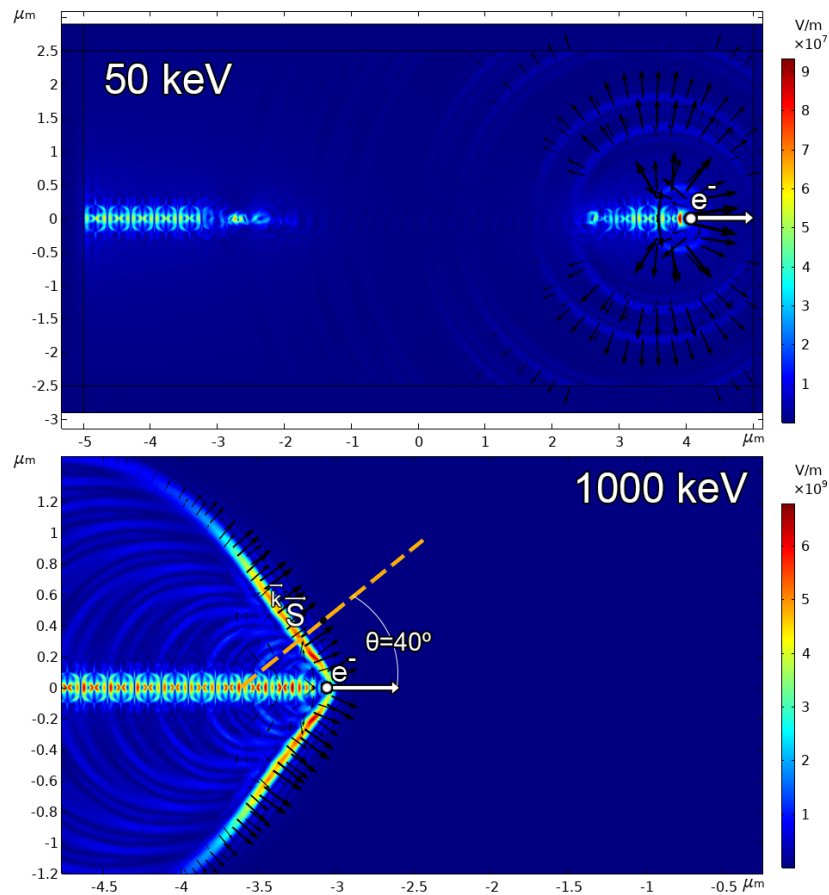


Figura 4.9: Mapas de la distribución de campos electromagnéticos generados por el movimiento de un electrón con velocidad constante de  $\beta = 0.41c$  (50 keV) y de  $\beta = 0.94c$  (1000 keV) en un medio infinito, isótropo y homogéneo caracterizado por su índice de refracción  $n=1.33$ .

La figura 4.9 muestra la simulación de los mapas de la distribución de campos electromagnéticos generados por el movimiento de un electrón con velocidad constante de  $\beta=0.41c$  (50 keV) y para  $\beta=0.94c$  (1000 keV) en un medio infinito, isótropo y homogéneo caracterizado por su índice de refracción  $n=1.33$  (agua). Si la velocidad de la partícula es menor que la velocidad de la radiación en el medio, los frentes de onda producen interferencia destructiva. Si por el contrario la velocidad de la partícula es mayor que la velocidad de la radiación en el medio, los frentes de onda que va generando el electrón en su trayectoria interferirán constructivamente, de manera que formará un frente de onda orientado tal como muestra la simulación. Mencionar que la estela que se observa en las figuras dejada por el electrón en el eje de su trayectoria, es fruto de los tiempos de cálculo numérico y está relacionada con la implementación del electrón, no como una partícula puntual sino como un pulso gaussiano de densidad de corriente.

### 4.3.2 Distribución espectral

La distribución que da cuenta del número de fotones Cherenkov emitidos por unidad de longitud y distancia viene dada por:

$$\frac{d^2N}{dzd\lambda} = 2\pi\alpha \cdot \frac{1}{\lambda^2} \left( 1 - \frac{1}{\beta^2 n(\lambda)^2} \right) \propto \frac{1}{\lambda^2} \quad (4.14)$$

En donde  $\alpha$  es la constante de estructura fina, con un valor aproximado de  $1/137$ . Tal y como se aprecia en la Figura 4.10, se obtiene un valor máximo local de fotones emitidos, para medios materiales transparentes, en la región del ultravioleta cercano (presentando varios máximos según el espectro de índice de refracción del material, como en el caso del agua).

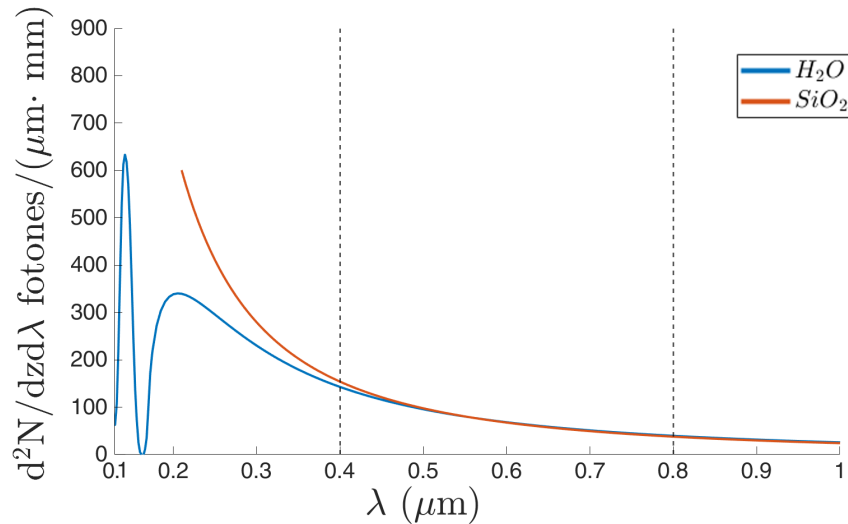


Figura 4.10: Distribución espectral del número de fotones Cherenkov emitidos por unidad de longitud de onda y de distancia recorrida para un electrón.



Esta curva pone de manifiesto la importancia en la elección de materiales dieléctricos para visualizar la radiación Cherenkov, surgiendo así un interés en reproducir el fenómeno para longitudes de ondas mayores acordes a las dimensiones de los dispositivos empleados.

### 4.3.3 Emisión Cherenkov en intercaras entre varios medios

Como se ha comentado, los resultados anteriores ponen de manifiesto las predicciones teóricas y los experimentos realizados en 1934 por Sergei Vavilov, Pável Cherenkov, Ilya Frank e Igor Tamm [56] y constatados a lo largo de las décadas posteriores a través de distintas líneas de investigación y aplicaciones experimentales [57–59]. Sin embargo, limitar la comprensión del fenómeno a un estadio tan restringido no daría cuenta de toda la fenomenología tan exótica que puede llegar a ponerse de manifiesto en aras de la reproducción de la radiación Cherenkov en estructuras fotónicas. Por ello, como método ilustrativo de la complejidad de este fenómeno electromagnético, se muestra en la Figura 4.11 la distribución de los campos electromagnéticos en un sistema compuesto por tres medios homogéneos para visualizar el papel determinante del ángulo límite de radiación Cherenkov y su efecto a la hora de confinar el campo electromagnético radiado a través de distintas capas de materiales dieléctricos.

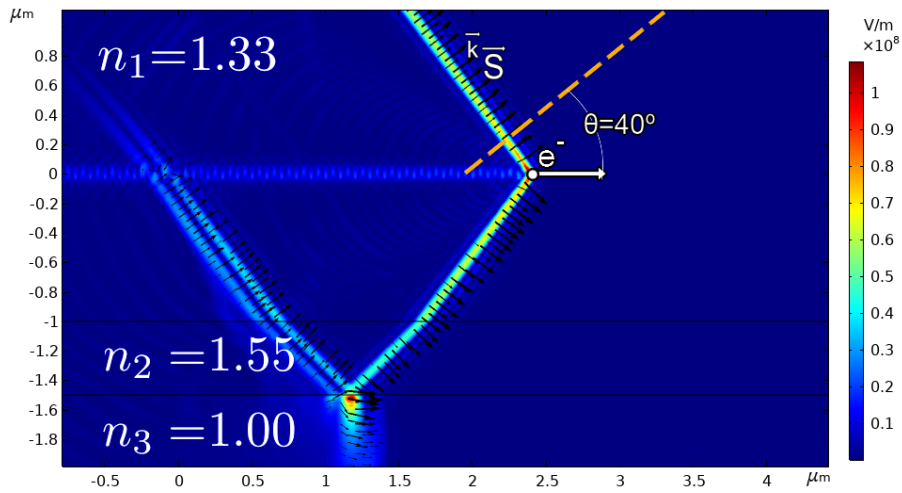


Figura 4.11: Un electrón con una energía cinética de 1000 keV viaja a lo largo de un material acuoso emitiendo radiación Cherenkov con el ángulo indicado en la figura. Los campos electromagnéticos inciden en la primera intercara propagándose en el interior de un cristal de cuarzo  $n_2 = 1.55$  bajo un ángulo refractado distinto al incidente. Finalmente, los fotones inciden en la intercara de cuarzo-vacío muy próximo a la condición de ángulo límite, poniendo de manifiesto el ángulo prácticamente rasante de los frentes de onda esféricos incidentes. A su vez, las múltiples reflexiones que se producen en las intercaras quedan representadas, dando lugar a una intensificación del campo eléctrico en la región posterior a la posición actual del electrón, interfiriendo con los frentes de ondas esféricos delimitados por el cono de radiación.

Una vez visualizado el fenómeno y la complejidad de su distribución a lo largo de estructuras multicapa, estamos en condiciones de abordar el propósito de este último capítulo.

### 4.3.4 Emisión Cherenkov por plasmones SPPs en SPCLS

Dado que ninguna partícula en vacío puede superar la velocidad de la luz, en un principio no es posible la emisión de radiación Cherenkov en vacío<sup>1</sup>. Esta afirmación es cierta en general, pero, como se verá a continuación, puede no cumplirse cuando la partícula que se desplaza en el vacío está en la proximidad de la superficie de un metal. En un apartado anterior se ha visto que un electrón viajando en el vacío en una trayectoria paralela a la superficie de un metal puede inducir la excitación de plasmones de superficie. En este apartado vamos a ver que esta interacción es la base de la emisión de radiación Cherenkov en dieléctricos inducida por electrones que viajan en el vacío y modulada por la excitación de plasmones de superficie. Los dispositivos emisores de luz cherenkov via plasmon de superficie (SPCLS) tienen un potencial prometedor tanto para aplicaciones asociadas al campo de la física de partículas como de la optoelectrónica y fotónica. Su estructura básica es muy simple, formada por la integración de una capa metálica delgada soportada por un sustrato dieléctrico. La capacidad de miniaturización de estas plataformas, en el rango de las micras, hace que los dispositivos SPCLS presenten un potencial prometedor como componentes opto-electrónicos.

#### Lámina delgada de plata sobre sustrato dieléctrico

La estructura propuesta [55], esquematizada en la Figura 4.12, está formada por una capa delgada de 20 nm de plata (Ag) sobre sustrato de SiC de alto índice de refracción en la región del visible. Como se comprobó en el apartado de excitación paralela, un haz de electrones paralelo a la superficie metálica. No obstante, al incluir un medio de función dieléctrica  $\epsilon_d$ , si se verifica la condición (4.12), los plasmones SPP producen radiación Cherenkov en el sustrato.

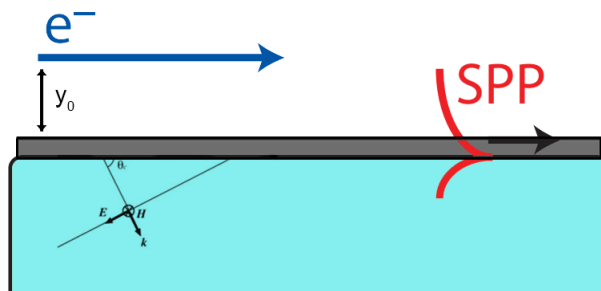


Figura 4.12: Haz de electrones desplazándose, en vacío, paralelos a la superficie de una lámina delgada de plata (Ag) de 20 nm sobre sustrato de carburo de silicio (SiC). Frente de ondas en el sustrato.

<sup>1</sup>Un artículo reciente [60] muestra que bajo la acción de fuertes campos electromagnéticos, las fluctuaciones producidas a nivel cuántico pueden inducir un índice de refracción efectivo anisótropo permitiendo la emisión de radiación Cherenkov en vacío.

La curva de dispersión del conjunto formado por una lámina de plata sobre un sustrato dieléctrico permite, la excitación de un modo asimétrico (rama superior de la relación de dispersión) y otro simétrico (rama inferior) al emplear un haz de electrones en vacío paralelos a una superficie metálica (ver Figura 4.13). No obstante, solo cuando la energía cinética de la partícula cargada es mayor que el umbral para la producción de radiación Cherenkov se produce la excitación de plasmones de superficie del modo asimétrico.

$$\frac{(\varepsilon_m k_1 - k_2)}{i\varepsilon_m k_3 - \varepsilon_d k_2} e^{-k_2 h} = \frac{(\varepsilon_m k_1 + k_2)}{(i\varepsilon_m k_3 + \varepsilon_d k_2)} e^{k_2 h} \quad (4.15)$$

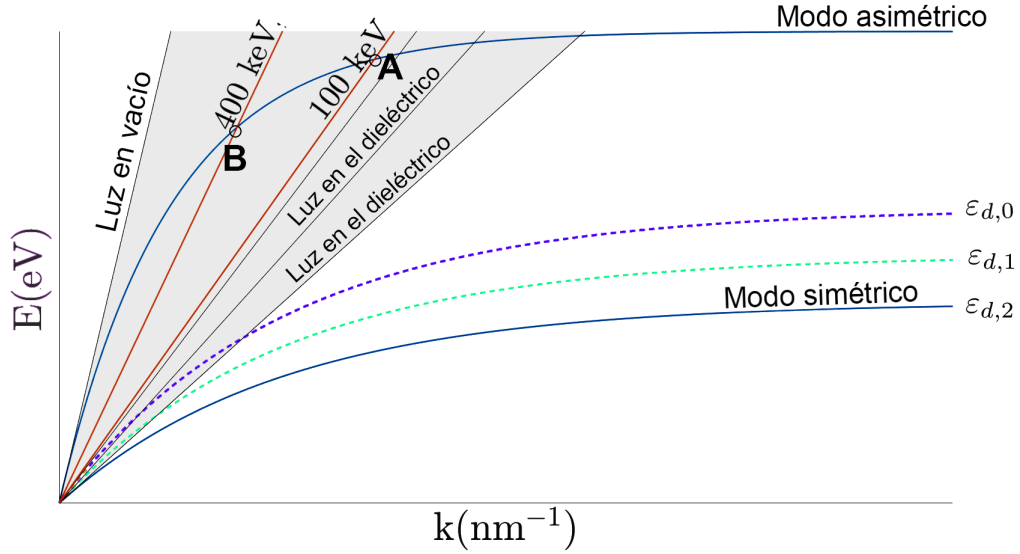


Figura 4.13: Curvas de dispersión para una estructura metal-sustrato con diferentes valores de la función dieléctrica. El valor de la función dieléctrica del sustrato disminuye de la rama discontinua con  $\varepsilon_{d,0}$ , pasando por  $\varepsilon_{d,1}$ , a la continua  $\varepsilon_{d,2}$ . Las rectas del haz de electrones con energías de 100 keV y 400 keV intersectan con el modo asimétrico en distintos puntos de operación A (luz de 330 nm, 3.75 eV) y B (luz de 350 nm, 3.54 eV), respectivamente. En la región sombreada se verifica la condición de radiación Cherenkov en el sustrato.

En donde  $k_0 = \omega/c$ ,  $k_1 = \sqrt{k_x^2 - k_o^2}$ ,  $k_2 = \sqrt{k_x^2 - \varepsilon_m k_0^2}$ ,  $k_3 = \sqrt{\varepsilon_d k_0^2 - k_x^2}$ ,  $k_x$  es el vector de onda en la dirección asociada,  $\varepsilon_m$  y  $\varepsilon_d$  son la función dieléctrica del metal y el sustrato dieléctrico, respectivamente. El espesor de la lámina de plata  $h$  es de 20 nm. Mediante esta geometría en excitación paralela, los plasmones de superficie pueden transformarse en radiación Cherenkov. En este diseño tienen lugar dos modos en la relación de dispersión. No obstante, si bien es posible excitar ambos modos para un haz de electrones acelerado a bajas energías, solo uno de ellos puede excitarse en combinación con la radiación Cherenkov mediante este diseño. La energía resultante viene determinada por la intersección de la relación de dispersión del haz con la curva de dispersión del plasmón de superficie. Como dicho punto se encuentra en la región comprendida entre la recta de dispersión para la luz en el vacío y la luz en el medio, la excitación de plasmones de superficie vendrá acompañada de la propagación de

un frente de ondas con las propiedades de la radiación Cherenkov, en el medio en el que la partícula no está inmersa. Para ello, la longitud de onda de emisión puede ajustarse seleccionando la energía del haz. Mediante este procedimiento, se asegura que la velocidad de fase de la onda que se propaga en el dieléctrico sea mayor que la velocidad de fase de la luz en dicho medio. Este es el principio de funcionamiento para el diseño y desarrollo de los dispositivos SPCLS [55].

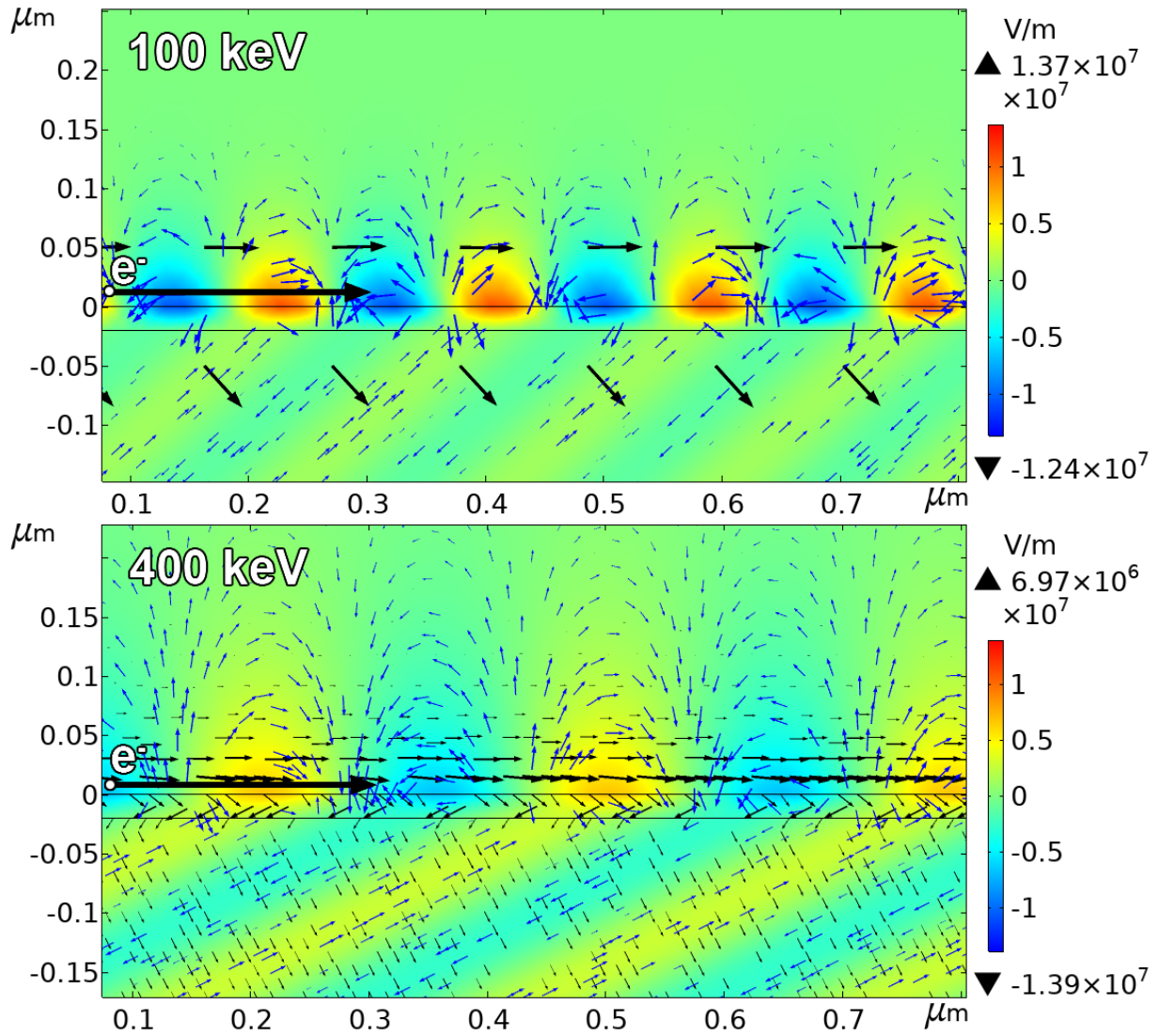


Figura 4.14: Excitación de plasmones de superficie en la intercara vacío-metal por un haz de electrones paralelo a la misma y emisión de radiación Cherenkov en el sustrato. Figura superior: mediante un haz de electrones a 100 keV. Figura inferior: mediante un haz de electrones a 400 keV.

La Figura 4.14 muestra la evaluación de la intensidad de campo eléctrico (evaluado a 330 nm) en la excitación del plasmón SPP la intercara vacío-metal por un haz de electrones paralelo a la misma y la emisión de radiación Cherenkov en el sustrato. La figura superior corresponde a un haz de electrones

de 100 keV ( $\beta=0.55$ ) y el inferior de 400 keV ( $\beta=0.84$ ). Para el haz de electrones de menor energía, se obtienen plasmones SPP para fotones de mayor energía y estos están caracterizados por un vector de onda mayor que en el caso correspondiente para haces de alta energía, por lo que la longitud de penetración en el vacío es menor. La producción de radiación Cherenkov se logra, en ambos casos, en el sustrato. No obstante, como puede apreciarse para electrones acelerados a energías menores la fenomenología, si bien se reproduce, no es apreciable en comparación a energías superiores. Por ello, surge la necesidad de introducir un nuevo diseño que permita la excitación de ambos fenómenos a energías menores.

### Estructura multicapa dieléctrico-metal-sustrato

Los dispositivos SPCLS ofrecen un potencial prometedor tanto para aplicaciones asociadas al campo de la física de partículas como de la optoelectrónica y fotónica. Su estructura simple, formada por la integración de una capa metálica delgada soportada por un sustrato dieléctrico, permite la excitación de plasmones de superficie en la intercara metálica por el movimiento de un haz de electrones paralelo a dicha superficie y, cuando se cumplen las condiciones necesarias para ello, se produce la emisión de radiación Cherenkov en el soporte dieléctrico. La capacidad de miniaturización de estas plataformas, en el rango de las micras y nanómetros, hace que los dispositivos SPCLS presenten un potencial prometedor como componentes electrónicos. Otra característica importante de los SPCLS es que la radiación emitida puede amoldarse a un rango amplio de frecuencias seleccionando la energía del haz. La frecuencia de la radiación emitida disminuirá a medida que la energía cinética del haz de electrones aumente. Sin embargo, para radiación en bajas frecuencias, se requiere un haz acelerado a altas energías, incluso del orden de 1 MeV. Todo ello constituye un gran desafío para lograr aplicaciones prácticas de las estructuras SPCLS. Por ello, es de gran interés el conocimiento del comportamiento de la relación de dispersión en estos dispositivos. Si se añade al diseño descrito en el apartado anterior una fina capa de dieléctrico ( $Ta_2O_5$  de 20 nm) sobre la lamina metálica (ver Figura 4.15), se logra la excitación de plasmones de superficie con fotones de más baja energía.

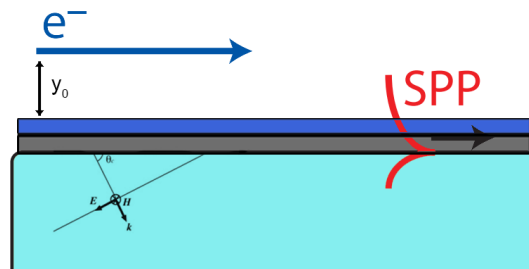


Figura 4.15: Haz de electrones desplazándose, en vacío, paralelos ( $d = 10$  nm) a la superficie de una lámina delgada de pentaóxido de tántalo ( $Ta_2O_5$ ) de 20 nm sobre la estructura de lámina de plata (Ag) de 20 nm sobre sustrato de carburo de silicio (SiC). Frente de ondas en el sustrato.

Para una estructura planar SPCLS con una lámina delgada de plata (Ag) incrustada entre un substrato y una capa fina de material dieléctrico, la resolución de los campos electromagnéticos y la imposición de las condiciones de contorno conduce a la siguiente relación de dispersión (Figura 4.16):

$$\varepsilon_m k_2 \frac{2\varepsilon_f k_1 \cosh(k_2 d) + 2k_2 \sinh(k_2 d)}{2\varepsilon_f k_1 \sinh(k_2 d) + 2k_2 \cosh(k_2 d)} = \varepsilon_f k_3 \frac{2\varepsilon_m k_4 \cosh(k_3 h) + 2\varepsilon_d k_3 \sinh(k_3 h)}{2\varepsilon_d k_3 \cosh(k_3 h) - 2\varepsilon_m k_4 \sinh(k_3 h)} \quad (4.16)$$

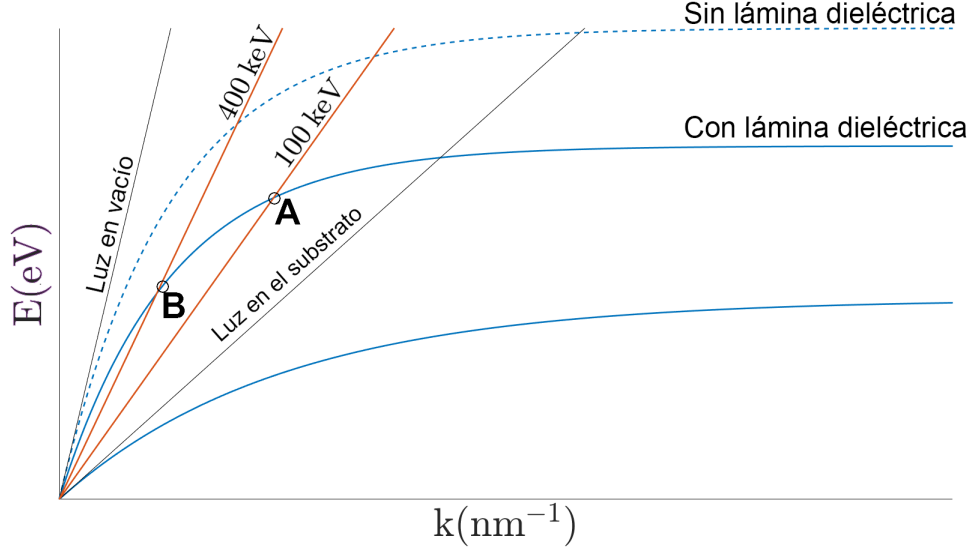


Figura 4.16: Relación de dispersión para la estructura dieléctrico-metal-substrato planteada. Las rectas correspondientes a los haces de electrones con energías de 100 keV y 400 keV cortan con el modo asimétrico en distintos puntos de operación a una energía menor que en la estructura anterior. Los puntos A y B se corresponden con fotones de 400 nm (3.10 eV) y 550 nm (2.25 eV), respectivamente. En la región sombreada se verifica la condición de radiación Cherenkov en el substrato.

En donde  $k_0 = \omega/c$ ,  $k_1 = \sqrt{k_x^2 - k_0^2}$ ,  $k_2 = \sqrt{k_x^2 - \varepsilon_f k_0^2}$ ,  $k_3 = \sqrt{k_x^2 - \varepsilon_m k_0^2}$ ,  $k_4 = \sqrt{k_x^2 - \varepsilon_d k_0^2}$ . Siendo  $\omega$  la frecuencia angular,  $k_0$  el vector de onda en el vacío,  $k_x$  el vector de onda en la dirección paralela de la superficie. Los espesores  $d$  y  $h$  se corresponden con el grosor de la capa dieléctrica y la capa metálica, respectivamente. Las funciones dieléctricas  $\varepsilon_m$ ,  $\varepsilon_d$  y  $\varepsilon_f$  hacen referencia la permitividad eléctrica del metal, la capa substrato y la capa delgada de dieléctrico depositada sobre el metal. En el límite  $d = 0$ , las expresiones (4.15) y (4.16) coinciden.

La capa de dieléctrico colocada sobre la capa de metal, tiene como primer efecto significativo disminuir el valor asintótico de la energía de excitación resonante de los plasmones de superficie, es decir se va a poder excitar plasmones de superficie de forma resonante con menores energías características (mayores longitudes de onda). Este efecto se muestra de forma cualitativa en la Figura 4.16. dado que la emisión Cherenkov asociada a esta configuración está sintonizada a la de la excitación del plasmón



de superficie correspondiente, este hecho va a significar que la emision cherenkov asociada será también a menores energías (mayores longitudes de onda), luego aparece como una vía alternativa para sintonizar el rango de longitudes de onda de emisión Cherenkov en estos dispositivos.

La figura 4.17 muestra mapas de intensidad de campo eléctrico para electrones de 100 keV ( $\lambda_{SPP}=400$  nm) y 400 keV ( $\lambda_{SPP}=550$  nm). En este caso, además de la variación del rango de longitudes de onda en la emisión Cherenkov mencionada, se observa que la intensidad de la emisión Cherenkov en el sustrato dieléctrico aumenta al aumentar la energía del haz de electrones, (es decir, al aumentar la longitud de onda de la emisión Cherenkov).

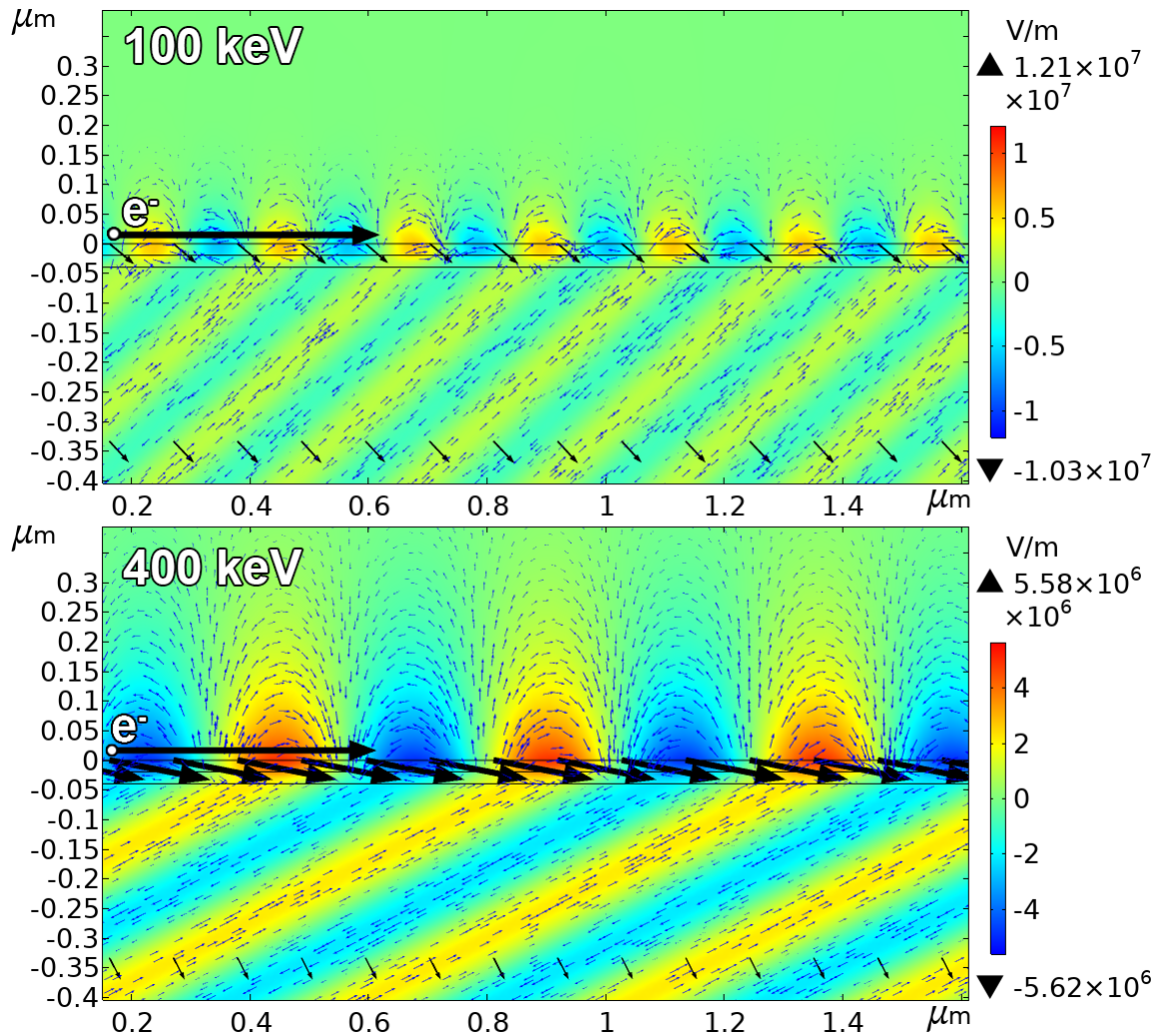


Figura 4.17: Excitación de plasmones de superficie en la intercara dieléctrico-vacío-metal por un haz de electrones paralelo a la misma y emisión de radiación Cherenkov en el sustrato. Figura superior: mediante un haz de electrones a 100 keV. Figura inferior: mediante un haz de electrones a 400 keV.

Estos resultados ponen de manifiesto que los mecanismos que gobiernan las estructuras SPCLS difieren de otros tipos de radiación Cherenkov [31, 56, 61–63]. Para los escenarios habituales donde se pone en evidencia la radiación Cherenkov, esta presenta un espectro de radiación amplio y continuo, donde la intensidad máxima radiada depende, como indicaba la Figura 4.10, de la respuesta del medio a la longitud de onda de los fotones emitidos. Para las estructuras que se han desarrollado en este último apartado, el movimiento uniforme del haz de electrones no excita la radiación Cherenkov en el metal directamente. En su lugar, el haz de electrones excita los plasmones SPP primero y, a continuación, se transforman en radiación Cherenkov en el medio dieléctrico activo (SiC), tanto para el caso en el que se emplea únicamente una película metálica (Ag) como para el conjunto dieléctrico-metal ( $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Ag}$ ). En consecuencia, la velocidad del haz debe igualar a la velocidad de fase del plasmón SPP y la energía radiada vendrá determinada por el punto de operación, esto es, los plasmones SPP en las estructuras SPCLS actúan como filtros de frecuencia sintonizables. En esa línea de avances recientes, materiales como el  $\text{MgO-TiO}_2$ , silicio poroso, ZnSe, SiC y el  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  presentan propiedades ópticas excelentes para el propósito de sintonizado y ajuste de la condición de excitación de plasmones SPP y radiación Cherenkov, trasladando una fenomenología del ultravioleta al rango visible.

Al mismo tiempo, la dependencia del parámetro  $\beta$  con la partícula considerada en función de su masa en reposo, la radiación Cherenkov sirve como principio de operación para una amplia familia de detectores de partículas en función del ángulo de fotones Cherenkov proyectados. Por ello, la utilización de plataformas SCPLS se presenta como una alternativa [64], para bajas energías, de los detectores [65, 66] convencionales de radiación Cherenkov (contadores diferenciales, absorción total, umbral y de anillos).



# Capítulo 5

## Conclusiones

La librería WaveOptics de COMSOL Multiphysics es una herramienta de resolución de ecuaciones fundamentales electromagnéticas en geometrías complejas, robusta y versátil, capaz de poner de manifiesto de forma eficiente fenomenologías fotónicas difícilmente abordables de forma analítica.

En intercaras metal-dieléctrico y en la superficie de cristales dieléctricos truncados es posible la excitación de modos superficiales con luz, en el primer caso llamados polaritones de plasmón de superficie (SPP) y en el segundo ondas superficiales de Bloch (BSW). La excitación de SPP es consecuencia de las características dieléctricas de la intercara metal-dieléctrico, mientras que la excitación de BSW se debe a fenómeno de interferencia. En ambos casos, mediante el concurso de plataformas sensoras con geometría Kretschmann es posible desarrollar transductores de alta sensibilidad basados en la interacción del campo evanescente de la onda superficial con fluidos. Mientras que los modos SPP sólo son compatibles con excitaciones con polarización TM, los modos BSW son compatibles tanto con polarización TE como TM, lo cual los hace interesantes para el desarrollo de plataformas sensoras de moléculas quirales en disolución.

A través del estudio de la interacción de nanoestructuras plasmónicas multicapa con electrones rápidos que viajan en el vacío es posible el diseño de sensores de partículas basados en detección de emisión Cherenkov sintonizada a voluntad en el visible, con aplicaciones en física de alta energía. En concreto, electrones rápidos viajando en el vacío paralelos a una estructura dieléctrico/metal/sustrato, con espesores para las capas de dieléctrico y de metal en el rango de algunas decenas de nanómetros, son capaces de excitar emisión de radiación Cherenkov en el sustrato, cuya longitud de onda e intensidad depende de la relación de dispersión de los plasmones de superficie excitados y de la energía de los electrones.

The WaveOptics library from COMSOL Multiphysics is a robust and versatile tool for solving fundamental electromagnetic equations in complex geometries, capable of efficiently revealing photonic phenomenologies that are difficult to approach analytically.

In metal-dielectric interfaces and on the surface of truncated dielectric crystals it is possible to excite surface modes with light, in the first case they are called surface plasmon polaritons (SPP) and in the second case surface Bloch waves (BSW). The excitation of SPP is a consequence of the dielectric characteristics of the metal-dielectric interface, while the excitation of BSW is due to interference phenomena. In both cases, through the use of sensor platforms with Kretschmann geometry it is possible to develop highly sensitive transducers based on the interaction of the surface wave evanescent field with fluids. While SPP modes are only compatible with TM polarization excitations, BSW modes are compatible with both TE and TM polarization, which makes them interesting for the development of chiral solution sensor platforms.

Through the study of the interaction of multilayer plasmonic nanostructures with fast electrons travelling in vacuum, it is possible to design particle sensors based on Cherenkov emission detection tuned to the visible at will, with applications in high energy physics. In particular, fast electrons travelling in vacuum parallel to a dielectric/metal/substrate structure, with thicknesses for the dielectric and metal layers in the range of dozens of nanometres, are able to excite Cherenkov radiation emission in the substrate, whose wavelength and intensity depend on the scattering ratio of the excited surface plasmons and the energy of the electrons.

# Apéndice A

## Simulaciones

### A.1 Excitación de plasmones SPP

A la hora de implementar en COMSOL Multiphysics la excitación de plasmones SPP, primero se procedió a través de un diseño que permitiera visualizar la imposibilidad de su generación mediante luz directamente desde un medio dieléctrico. Posteriormente, se introdujo la geometría Kretschmann-Raether.

#### Parámetros

Los parámetros introducidos fueron los siguientes:

Parámetros			
Nombre	Expresión	Valor	Descripción
alpha	0[deg]	0 rad	Ángulo de incidencia
nin	1.55	1.55	Índice de refracción (medio dieléctrico de entrada)
nnout	1.33	1.33	Índice de refracción (medio dieléctrico de salida)
lda0	800[nm]	8E-7 m	Longitud de onda de operación

#### Materiales

Se definieron valores constantes del índice de refracción para los medios dieléctricos, tal y como se indican en las ilustraciones, y se implementó una función de índice de refracción variable desde las librerías de materiales incluidas en COMSOL Multiphysics. En concreto: Au (Gold) (Hagemann et al. 1974: n,k 0.003542-0.8266  $\mu\text{m}$ )

## Puertos

Se implementaron puertos periódicos definidos por un campo eléctrico de componentes (0,0,1) para polarización-s y como un campo magnético (0,0,1) para la polarización-p. El campo de formulario correspondiente para el ángulo de incidencia se definió como alpha. Los campos correspondientes a los índices de refracción de los medios de los puertos de salida y entrada se definieron con los valores que se ilustran.

## Condiciones de contorno

En las fronteras verticales y paralelas del dominio de estudio se impusieron condiciones de contorno de Floquet periódicas definidas desde un puerto periódico. Para el modelo de la Figura A.1 se impuso además condiciones de dispersión en la cara exterior del medio metálico para evitar fenómenos de reflexión y dispersión no deseados.

## Mallado

De acuerdo a la práctica habitual en este tipo de aplicaciones, se seleccionó un mallado adaptativo triangular de arista  $\lambda_0/6$ .

## Estudio en longitud de onda

Se realizó un estudio para  $\lambda_0$  de valor  $\lambda_0$  (800 nm) y se añadió un barrido auxiliar para ángulos de incidencia alpha desde 0 a  $80^\circ$  en pasos de  $0.5^\circ$ .

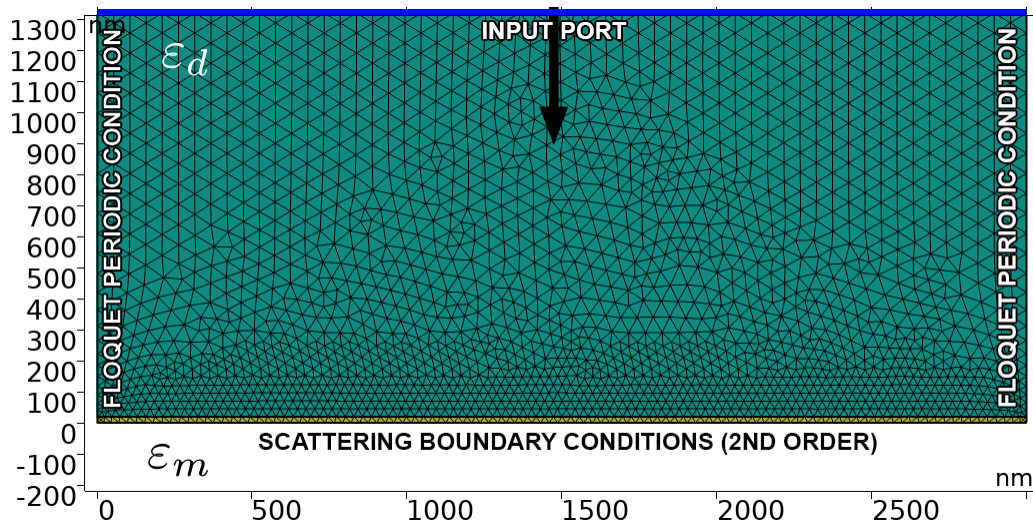


Figura A.1: Medio dieléctrico (en azul marino)  $\epsilon_d = 2.40$  ( $n_d = 1.55$ ) sobre una lámina delgada metálica de oro (en amarillo)  $\epsilon_m$  de 20 nm. Se seleccionó una longitud de onda de operación  $\lambda_0 = 800$  nm y se fijó un mallado triangular adaptativo de arista  $\lambda_0/6$ .

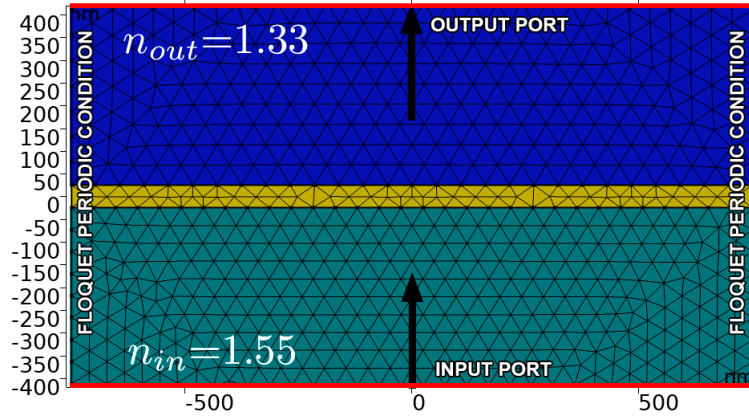


Figura A.2: Medio dieléctrico (en azul marino)  $\varepsilon_d = 2.40$  ( $n_d = 1,55$ ) sobre una lámina delgada metálica de oro (en amarillo)  $\varepsilon_m$  de 20 nm. Se seleccionó una longitud de onda de operación  $\lambda_0 = 800$  nm y se fijó un mallado triangular adaptativo de arista  $\lambda_0/6$ .

## A.2 Modelado de cristales fotónicos 1DPC

A la hora de implementar en COMSOL Multiphysics la excitación de ondas de Bloch BSW se implementó un diseño que se ilustra en la figura A.3, compuesto por cinco pares de capas de alto y bajo índice de refracción. El dieléctrico que sirvió como puerto de entrada se definió con un índice de refracción mayor que el de salida a la hora de visualizar el ángulo crítico en los mapas de reflectancia.

### Parámetros

Los parámetros introducidos fueron los siguientes:

Parámetros			
Nombre	Expresión	Valor	Descripción
alpha	0[deg]	0 rad	Ángulo de incidencia
nin	1.55	1.55	Índice de refracción (medio dieléctrico de entrada)
nnout	1.00	1.00	Índice de refracción (medio dieléctrico de salida)
lda0	400[nm]	4E-7 m	Longitud de onda de operación
d	100[nm]	1E-7 m	Espesor de cada capa del cristal truncado 1DPC
nh	2.06	2.06	Índice de refracción de la capa de alto índice
nl	1.45	1.45	Índice de refracción de la capa de bajo índice

### Materiales

Se definieron valores constantes del índice de refracción para los medios dieléctricos, tal y como se indican en las ilustraciones, a través de los parámetros mostrados en la tabla anterior.

## Puertos

Se implementaron puertos periódicos definidos por un campo eléctrico de componentes (0,0,1) para polarización-s y como un campo magnético (0,0,1) para la polarización-p. El campo de formulario correspondiente para el ángulo de incidencia se definió como alpha. Los campos correspondientes a los índices de refracción de los medios de los puertos de salida y entrada se definieron con los valores que se ilustran.

## Condiciones de contorno

En las fronteras verticales y paralelas del dominio de estudio se impusieron condiciones de contorno de Floquet periódicas definidas desde un puerto periódico.

## Mallado

De acuerdo a la práctica habitual en este tipo de aplicaciones, se seleccionó un mallado adaptativo triangular de arista  $\lambda_0/6$ .

## Estudio en longitud de onda

Se realizó un estudio compuesto de un barrido paramétrico en longitudes de onda comprendidas entre 300 nm y 900 nm, en etapas de 5 nm. Además, se añadió un barrido auxiliar para ángulos de incidencia alpha desde 0 a 80° en pasos de 0.5°.

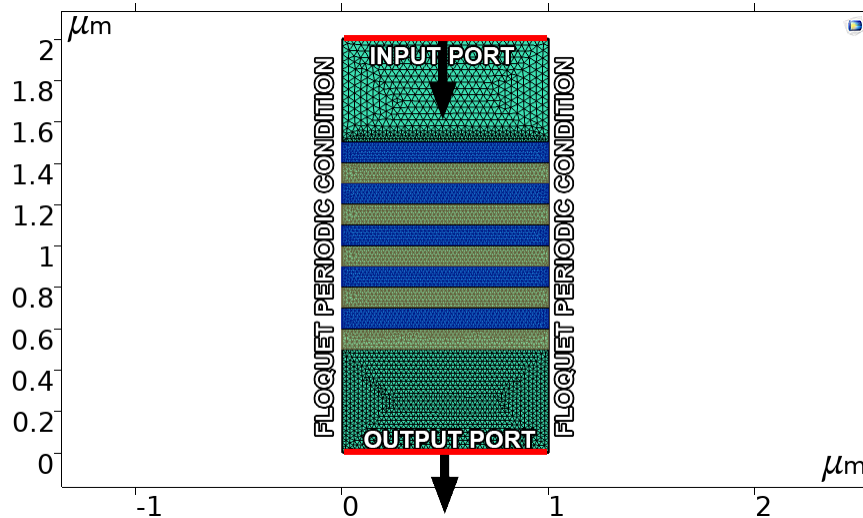


Figura A.3: Cristal fotónico 1DPC formado por cinco pares de capas de alto índice ( $n_h=2.06$ ) y bajo índice ( $n_l=1.45$ ). Los medios de entrada y salida tienen un índice de refracción  $n_{in}=1.55$  y  $n_{out}=1.00$ , respectivamente. Se fijó un mallado triangular adaptativo de arista  $\lambda_0/6$ .

### A.3 Radiación Cherenkov

Para visualizar la radiación Cherenkov se introdujeron los siguientes parámetros, variándose la energía cinética del electrón.

Parámetros			
Nombre	Expresión	Valor	Descripción
q	-1.6e-19 [C]	-1.6E-19 C	Carga del electrón
K	511[keV]	8.1871E-14 J	Energía cinética
E0	511[keV]	8.1871E-14 J	Energía en reposo
sigma	1 [nm]	1E-9 m	Parámetro sigma (desviación estándar)
beta	$\sqrt{1-(1/((K/E0)+1))^2}$	0.86603	Parámetro beta relativista
v0	beta*c_const	2.5963E8 m/s	Velocidad de la partícula

#### A.3.1 Estudio temporal

Para la visualización de la radiación Cherenkov en el dominio del tiempo se implementaron artefactos de COMSOL denominados Absorbing Layers (Capas absorbentes) para evitar reflexiones de los frentes de onda esféricos en las caras interiores. Se definió un tiempo de evaluación  $t_{eval}=9.2[\mu\text{m}]/v_0$  para la geometría diseñada en pasos de una décima de ese tiempo de evaluación. Se definió, dentro de COMSOL, como una nueva variable la densidad de corriente tal y como se detalla en la ecuación (4.11).

#### A.3.2 Estudio en frecuencia

Para el estudio en frecuencia, esto es, una solución estacionaria del problema de Helmholtz con un término de fuente, se introdujo la ecuación (4.3) como la siguiente variable:

$$J_f = -q \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \exp(-i \cdot \text{ewfd} \cdot \omega \cdot (x + 2[\mu\text{m}])/v_0) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sigma} \cdot \exp\left(-\frac{(y - 5[\text{nm}])^2}{(2\sigma)^2}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sigma} \cdot \text{ewfd} \cdot \omega$$

Además, se añadieron artefactos (Perfect Matched Layers o PMLs) de simulación como en el caso anterior para eliminar fenómenos de reflexión en las caras interiores del dominio simulado. El estudio evaluado comprendió un barrido paramétrico en longitudes de onda desde los 300 nm a los 800 nm, en pasos de 50 nm, y una evaluación simultánea para valores de la energía cinética comprendida entre los 100 keV y los 1000 keV, en pasos de 100 keV.

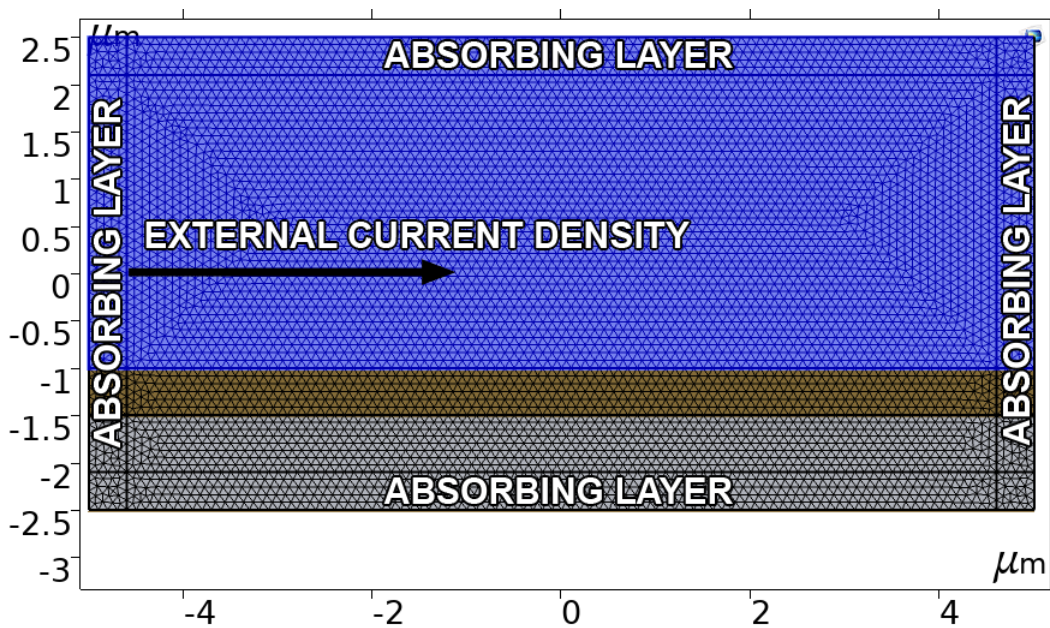


Figura A.4: Tres medios dieléctricos de distinto índice de refracción  $n=1.33$  (azul),  $n=1.55$  (marrón) y  $n=1.00$  (gris). Los marcos interiores de la figura son artefactos introducidos en COMSOL (Absorbing Layers). Se fijó un mallado triangular adaptativo de arista  $\lambda_0/6$ .

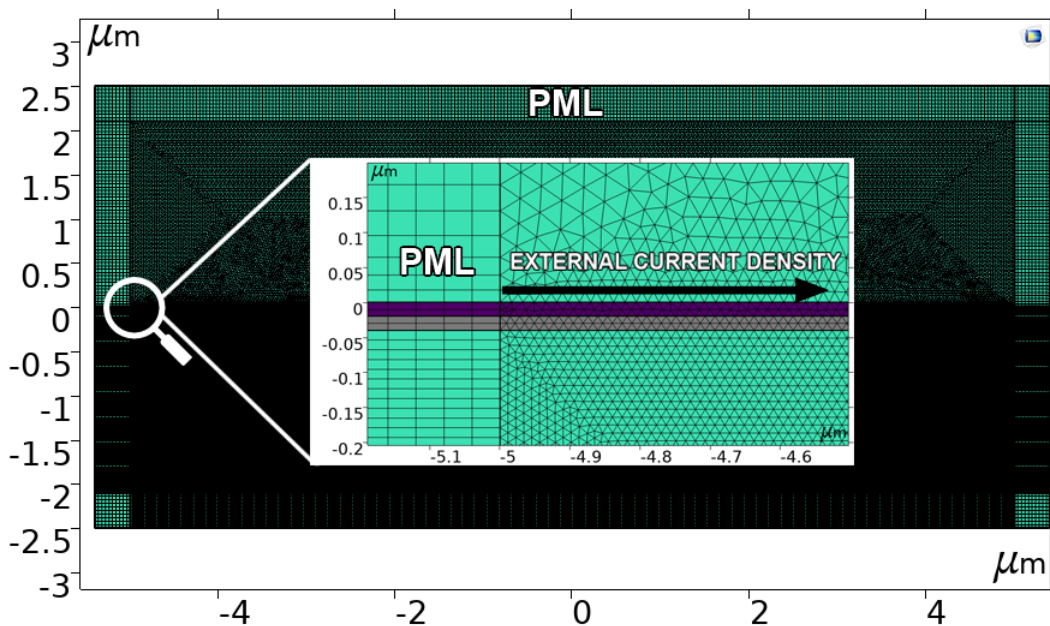


Figura A.5: Estructura SPCLS Vacío/ $Ta_2O_5$ /Ag/SiC. Los marcos interiores de la figura son artefactos introducidos en COMSOL (PMLs). Se fijó un mallado triangular adaptativo de arista  $\lambda_0/6$ . se fijó un mallado triangular adaptativo de arista  $\lambda_0/6$ .



# Bibliografía

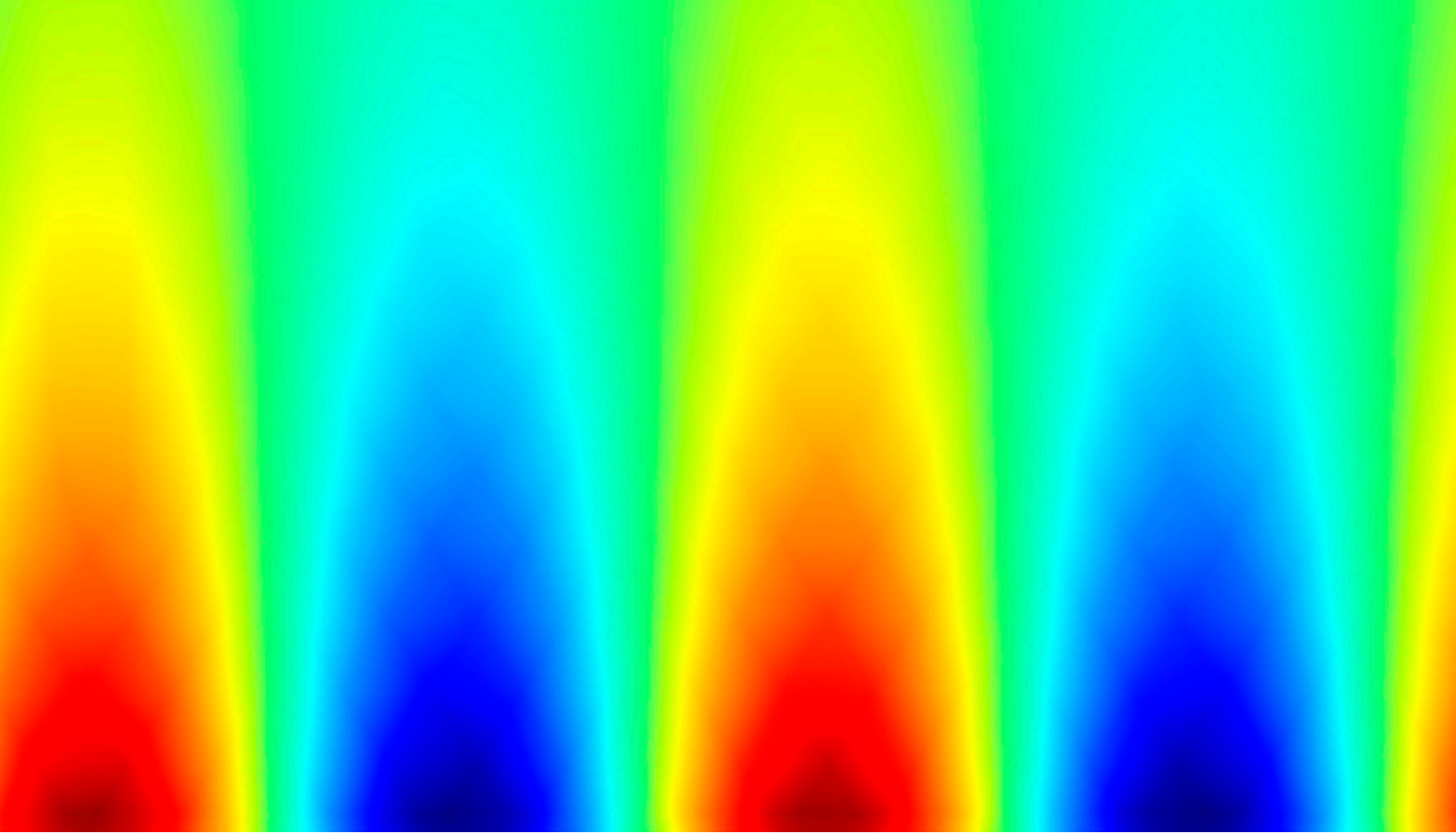
- [1] J. D. Jackson, “Classical electrodynamics,” 1999.
- [2] D. J. Griffiths, “Introduction to electrodynamics,” 2005.
- [3] D. M. Etter, D. C. Kuncicky, and D. W. Hull, *Introduction to MATLAB*. Prentice Hall, 2002.
- [4] F. Malbos, M. Bogdanski, and M. Strauss, “Prediction of the loudspeaker total harmonics distortion using comsol multiphysics® software,”
- [5] F. G. Curtis, K. Ekici, and J. D. Freels, “Fluid-structure interaction modeling of high-aspect ratio nuclear fuel plates using comsol,” in *COMSOL Multiphysics Conference*, 2013.
- [6] S. Nagarajan, L. Stella, L. A. Lawton, J. T. Irvine, and P. K. Robertson, “Mixing regime simulation and cellulose particle tracing in a stacked frame photocatalytic reactor,” *Chemical engineering journal*, vol. 313, pp. 301–308, 2017.
- [7] M. Carrizales and L. W. Lake, “Two-dimensional comsol simulation of heavy-oil recovery by electromagnetic heating,” in *COMSOL Conference held in Boston, Massachusetts, USA*, pp. 10–13, 2009.
- [8] C. Fietz, Y. Urzhumov, and G. Shvets, “Complex k band diagrams of 3d metamaterial/photonic crystals,” *Optics express*, vol. 19, no. 20, pp. 19027–19041, 2011.
- [9] J. Polo, T. Mackay, and A. Lakhtakia, *Electromagnetic surface waves: a modern perspective*. Newnes, 2013.
- [10] B. M. Bolotovskii, “Vavilov–cherenkov radiation: its discovery and application,” *Physics-Uspekhi*, vol. 52, no. 11, p. 1099, 2009.
- [11] T. Zhao, R. Zhong, M. Hu, X. Chen, P. Zhang, S. Gong, and S. Liu, “Cherenkov radiation via surface plasmon polaritons excitation by an electron beam in a layered metal-dielectric structure,” *The European Physical Journal D*, vol. 69, no. 5, p. 120, 2015.
- [12] C. Johnson, *Numerical solution of PDEs by the finite element method*. Cambridge University Press, 1 ed., 1988.

- [13] J. L. Volakis, J. L. Volakis, A. Chatterjee, and L. C. Kempel, *Finite element method for electromagnetics*. Universities Press, 1998.
- [14] C. Multiphysics, “Wave optics module - user’s guide,” 2018.
- [15] R. Ritchie, “Surface plasmons in solids,” *Surface Science*, vol. 34, no. 1, pp. 1–19, 1973.
- [16] W. Magnus and S. Winkler, *Hill’s equation*. Courier Corporation, 2013.
- [17] R. W. Wood, “Xlii. on a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 4, no. 21, pp. 396–402, 1902.
- [18] U. Fano, “The theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces (sommerfeld’s waves),” *JOSA*, vol. 31, no. 3, pp. 213–222, 1941.
- [19] A. Otto, “Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection,” *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, vol. 216, no. 4, pp. 398–410, 1968.
- [20] E. Kretschmann and H. Raether, “Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light,” *Z. Naturforsch. a*, vol. 23, no. 12, pp. 2135–2136, 1968.
- [21] B. Liedberg, C. Nylander, and I. Lunström, “Surface plasmon resonance for gas detection and biosensing,” *Sensors and actuators*, vol. 4, pp. 299–304, 1983.
- [22] E. Zeidan, S. Li, Z. Zhou, J. Miller, and M. G. Sandros, “Single-multiplex detection of organ injury biomarkers using sprig based nano-immunosensor,” *Scientific reports*, vol. 6, p. 36348, 2016.
- [23] U. Anders, J. V. Schaefer, F.-E. Hibti, C. Frydman, D. Suckau, A. Plückthun, and R. Zenobi, “Sprig-maldi ms: characterization and identification of a kinase from cell lysate by specific interaction with different designed ankyrin repeat proteins,” *Analytical and bioanalytical chemistry*, vol. 409, no. 7, pp. 1827–1836, 2017.
- [24] I. Almog, M. Bradley, and V. Bulovic, “The lorentz oscillator and its applications,” *Massachusetts Institute of Technology*, 2011.
- [25] P. Winsemius, F. Van Kampen, H. Lengkeek, and C. Van Went, “Temperature dependence of the optical properties of au, ag and cu,” *Journal of Physics F: Metal Physics*, vol. 6, no. 8, p. 1583, 1976.
- [26] V. Koju, *Computational Modeling of Bloch Surface Waves in One-Dimensional Periodic and Aperiodic Multilayer Structures*. PhD thesis, Middle Tennessee State University, 2017.
- [27] R. S. Cahn, C. Ingold, and V. Prelog, “Specification of molecular chirality,” *Angewandte Chemie International Edition in English*, vol. 5, no. 4, pp. 385–415, 1966.

- [28] C. Powell and J. Swan, "Origin of the characteristic electron energy losses in aluminum," *Physical Review*, vol. 115, no. 4, p. 869, 1959.
- [29] Y.-Y. Teng and E. A. Stern, "Plasma radiation from metal grating surfaces," *Physical Review Letters*, vol. 19, no. 9, p. 511, 1967.
- [30] M. Pelton, J. Aizpurua, and G. Bryant, "Metal-nanoparticle plasmonics," *Laser & Photonics Reviews*, vol. 2, no. 3, pp. 136–159, 2008.
- [31] F. G. De Abajo, "Optical excitations in electron microscopy," *Reviews of modern physics*, vol. 82, no. 1, p. 209, 2010.
- [32] K. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media," *IEEE Transactions on antennas and propagation*, vol. 14, no. 3, pp. 302–307, 1966.
- [33] S. Babar and J. Weaver, "Optical constants of cu, ag, and au revisited," *Applied Optics*, vol. 54, no. 3, pp. 477–481, 2015.
- [34] Y. Zhang, S. He, W. Guo, Y. Hu, J. Huang, J. R. Mulcahy, and W. D. Wei, "Surface-plasmon-driven hot electron photochemistry," *Chemical reviews*, vol. 118, no. 6, pp. 2927–2954, 2017.
- [35] T. Hirakawa and P. V. Kamat, "Photoinduced electron storage and surface plasmon modulation in ag@ tio2 clusters," *Langmuir*, vol. 20, no. 14, pp. 5645–5647, 2004.
- [36] M.-K. Lee, T. G. Kim, W. Kim, and Y.-M. Sung, "Surface plasmon resonance (spr) electron and energy transfer in noble metal- zinc oxide composite nanocrystals," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 112, no. 27, pp. 10079–10082, 2008.
- [37] S. Liu, C. Zhang, M. Hu, X. Chen, P. Zhang, S. Gong, T. Zhao, and R. Zhong, "Coherent and tunable terahertz radiation from graphene surface plasmon polaritons excited by an electron beam," *Applied Physics Letters*, vol. 104, no. 20, p. 201104, 2014.
- [38] N. Yamamoto, H. Sugiyama, and A. Toda, "Cherenkov and transition radiation from thin plate crystals detected in the transmission electron microscope," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 452, no. 1953, pp. 2279–2301, 1996.
- [39] S. Gong, M. Hu, R. Zhong, X. Chen, P. Zhang, T. Zhao, and S. Liu, "Electron beam excitation of surface plasmon polaritons," *Optics express*, vol. 22, no. 16, pp. 19252–19261, 2014.
- [40] W. K. Panofsky and M. Phillips, *Classical electricity and magnetism*. Courier Corporation, 2005.

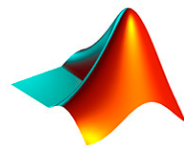
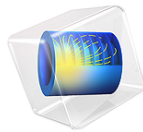
- [41] V. Ginzburg and I. Frank, “To the theory of transition radiation,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 16, p. 15, 1946.
- [42] P. Goldsmith and J. Jelley, “Optical transition radiation from protons entering metal surfaces,” *Philosophical Magazine*, vol. 4, no. 43, pp. 836–844, 1959.
- [43] R. Ritchie, “Interaction of charged particles with a degenerate fermi-dirac electron gas,” *Physical Review*, vol. 114, no. 3, p. 644, 1959.
- [44] Y.-Y. Teng and E. A. Stern, “Plasma radiation from metal grating surfaces,” *Physical Review Letters*, vol. 19, no. 9, p. 511, 1967.
- [45] D. Heitmann, “Radiative decay of surface plasmons excited by fast electrons on periodically modulated silver surfaces,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 10, no. 3, p. 397, 1977.
- [46] N. Yamamoto, K. Araya, and F. G. de Abajo, “Photon emission from silver particles induced by a high-energy electron beam,” *Physical Review B*, vol. 64, no. 20, p. 205419, 2001.
- [47] S. Liu, M. Hu, Y. Zhang, Y. Li, and R. Zhong, “Electromagnetic diffraction radiation of a subwavelength-hole array excited by an electron beam,” *Physical Review E*, vol. 80, no. 3, p. 036602, 2009.
- [48] G. Adamo, K. MacDonald, Y. Fu, D. Tsai, F. G. de Abajo, and N. Zheludev, “Tuneable electron-beam-driven nanoscale light source,” *Journal of optics*, vol. 12, no. 2, p. 024012, 2010.
- [49] I. Konoplev, A. Cross, and A. Phelps, “Relativistic electron beam excitation of surface fields in artificial materials based on one-and two-dimensional periodic structures,” *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 39, no. 11, pp. 2610–2611, 2011.
- [50] A. Cook, R. Tikhoplav, S. Tochitsky, G. Travish, O. Williams, and J. Rosenzweig, “Observation of narrow-band terahertz coherent cherenkov radiation from a cylindrical dielectric-lined waveguide,” *Physical review letters*, vol. 103, no. 9, p. 095003, 2009.
- [51] X. Lin, S. Easo, Y. Shen, H. Chen, B. Zhang, J. D. Joannopoulos, M. Soljačić, and I. Kaminer, “Controlling cherenkov angles with resonance transition radiation,” *Nature Physics*, vol. 14, no. 8, pp. 816–821, 2018.
- [52] S. Xi, H. Chen, T. Jiang, L. Ran, J. Huangfu, B.-I. Wu, J. A. Kong, and M. Chen, “Experimental verification of reversed cherenkov radiation in left-handed metamaterial,” *Physical review letters*, vol. 103, no. 19, p. 194801, 2009.
- [53] V. G. Veselago, “Electrodynamics of substances with simultaneously negative and,” *Usp. Fiz. Nauk*, vol. 92, p. 517, 1967.

- [54] X. Lin and B. Zhang, “Normal doppler frequency shift in negative refractive-index systems,” *Laser & Photonics Reviews*, vol. 13, no. 12, p. 1900081, 2019.
- [55] S. Liu, P. Zhang, W. Liu, S. Gong, R. Zhong, Y. Zhang, and M. Hu, “Surface polariton cherenkov light radiation source,” *Physical review letters*, vol. 109, no. 15, p. 153902, 2012.
- [56] P. A. Cherenkov, “Visible emission of clean liquids by action of  $\gamma$  radiation,” in *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, vol. 2, pp. 451–454, 1934.
- [57] M. Markov and I. Zheleznykh, “Large-scale cherenkov detectors in ocean, atmosphere and ice,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 248, no. 1, pp. 242–251, 1986.
- [58] A. Cook, R. Tikhoplav, S. Tochitsky, G. Travish, O. Williams, and J. Rosenzweig, “Observation of narrow-band terahertz coherent cherenkov radiation from a cylindrical dielectric-lined waveguide,” *Physical review letters*, vol. 103, no. 9, p. 095003, 2009.
- [59] E. Garate, J. Walsh, C. Shaughnessy, B. Johnson, and S. Moustazis, “Cherenkov free electron laser operation from 375 to 1000  $\mu\text{m}$ ,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 259, no. 1-2, pp. 125–127, 1987.
- [60] A. J. Macleod, A. Noble, and D. A. Jaroszynski, “Cherenkov radiation from the quantum vacuum,” *Physical review letters*, vol. 122, no. 16, p. 161601, 2019.
- [61] V. L. Ginzburg *et al.*, “Radiation of uniformly moving sources (vavilov-cherenkov effect, transition radiation, and other phenomena),” *PHYSICS USPEKHI C/C OF USPEKHI FIZICHESKIKH NAUK*, vol. 39, pp. 973–982, 1996.
- [62] P. Schoessow, M. Conde, W. Gai, R. Konecny, J. Power, and J. Simpson, “High power radio frequency generation by relativistic beams in dielectric structures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 84, no. 2, pp. 663–667, 1998.
- [63] V. Zuev, “Vavilov-cherenkov phenomenon in metal nanofilms,” *arXiv preprint arXiv:0907.1145*, 2009.
- [64] I. Georgescu, “Čerenkov radiation: Light from ripples,” *Nature physics*, vol. 8, no. 10, pp. 704–704, 2012.
- [65] Ž. Brenčič, “Čerenkov effect: Review and usage in particle physics,”
- [66] TheGaleGroupInc., *Great Soviet Encyclopedia*. 1969-1978.



---

COMSOL  
MULTIPHYSICS®



MATLAB

