



Desarrollo de Aplicación para Modelar la Función Dieléctrica Compleja de los Sólidos.

Golfredo Pérez Fernández

Tutor: Juan Martín

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES. FACULTAD DE CIENCIAS.
LABORATORIO DE FÍSICA APLICADA
MÉRIDA, VENEZUELA

24 de noviembre de 2023

Resumen

La presente tesis representa un avance significativo en la exploración y caracterización de las propiedades ópticas de los materiales en estado sólido mediante la creación de una aplicación web dedicada al modelado preciso de la función dieléctrica. Esta función dieléctrica es fundamental, ya que sienta las bases para estudiar y comprender una amplia gama de respuestas ópticas al campo eléctrico, incluyendo fenómenos cruciales como la absorción óptica, la dispersión de la luz, la reflectividad, la refracción, la birrefringencia, la polarización, el desplazamiento de carga, la deformación eléctrica, la conducción eléctrica, la generación de calor, los efectos piezoelectricos, el cambio en la permitividad y la inducción electromagnética.

La integración innovadora del modelado de la función dieléctrica con el uso de modernas tecnologías proporciona una plataforma avanzada para la comprensión en profundidad de la compleja interacción entre los materiales sólidos y los campos eléctricos.

El enfoque de esta tesis no solo abre nuevas posibilidades para la investigación y la comprensión teórica, sino que también tiene el potencial de influir en el desarrollo de tecnologías y aplicaciones prácticas relacionadas con materiales sólidos y sus propiedades ópticas.

Agradecimientos

Acá van los agradecimientos

Índice general

1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	7
1.1. Introduccion	7
1.2. Planteamiento del Problema	7
1.3. Objetivo General	10
1.4. Objetivos Específicos	10
1.5. Justificación e Importancia del Proyecto	10
1.6. Alcances y Limitaciones	10
1.7. Metodología	11
2. MARCO TEORICO	13
2.1. Antecedentes	13
2.2. Espectro Optico	13
2.3. Clasificación de los procesos ópticos	19
2.4. Configuración experimental de radiación a incidencia normal a la superficie de una muestra	20
2.5. Relaciones Kramers-Kronig	22
2.6. Algoritmo Levenberg Marquardt	25
2.7. Límites de confianza	30
3. CAPITULO 3: METODOLOGIA	31
3.1. Diseño de la Aplicacion Web	31
3.2. Implementación y Desarrollo	31
3.3. Integracion de Asistentes GTPs para el analisis de resultados	31
4. CAPITULO 4: RESULTADOS y DISCUSIONES	34
4.1. Comparación con Métodos y Herramientas Existentes	34
4.2. Interpretación y Conclusiones de los Resultados Obtenidos	34
4.3. Limitaciones de la Aplicación y Posibles Mejoras	34
5. CAPITULO 5: CONCLUSIONES	35
5.1. Resumen de los Hallazgos	35
5.2. Contribuciones de la Tesis al Campo de la Óptica Física y la Programación	35
Bibliografía	36

Índice de figuras

2.1. Función dieléctrica triangular	29
2.2. Función variacional	29
3.1. Compute trends are slower than previously reported	32

Índice de cuadros

3.1. Compute trends are slower than previously reported	33
---	----

Capítulo 1

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1. Introduccion

La interacción entre una onda electromagnética y la materia es un fenómeno fascinante que se describe mediante las ecuaciones de Maxwell. Estas ecuaciones proporcionan un marco para interpretar fenómenos ópticos en términos de cantidades observables en experimentos, tales como la reflectividad $\hat{r}(w)$, la transmisión $\hat{t}(w)$, y la absorción $\alpha(w)$ o la impedancia y el índice de refracción, estas relaciones ofrecen una visión detallada de la interacción de radiación con materia a diversas escalas de estudio.

Las cantidades del espectro óptico pueden derivarse a partir de dos parámetros fundamentales que constituyen la función dieléctrica, denotados como $\hat{\epsilon}(w)$ y $\hat{\epsilon}'(w)$. La parte $\hat{\epsilon}(w)$ es la componente real de la función dieléctrica y se asocia con la permitividad, mientras que $\hat{\epsilon}'(w)$ es la componente imaginaria y está relacionada con la capacidad de absorción del material.

El objetivo principal del proyecto es desarrollar una aplicación web que permita el modelado de la función dieléctrica mediante el análisis variacional Kramers-Kronig restringido de cantidades ópticas medibles. Esta herramienta será invaluable para físicos, químicos, astrónomos y cualquier persona que utilice técnicas ópticas para estudiar materiales, ya que la función dieléctrica contiene toda la información necesaria para explorar la estructura de bandas electrónicas, vibraciones de red, excitones, entre otros. Además, la investigación se enfocará en la creación de una aplicación web interactiva que incorporará las mejores prácticas de programación. Esta aplicación no solo facilitará el análisis y procesamiento eficiente de los resultados derivados del análisis variacional Kramers-Kronig restringido, sino que también garantizará una experiencia de usuario óptima y un rendimiento excepcional.

1.2. Planteamiento del Problema

La interacción de la radiación electromagnética y la materia es compleja pero la respuesta de la materia en la posición r y en el tiempo t a un campo eléctrico $E(r', t')$ en la posición r' y tiempo t' puede ser escrita como:

$$D_i(r, t) = \int \int \bar{\epsilon}_{ij}(r, r', t, t') E_j(r', t') dt' dr' \quad (1.1)$$

Donde i y j se refiere a las componentes del campo eléctrico, desplazamiento eléctrico D y el tensor dieléctrico $\bar{\epsilon}$.

En sólidos Homogéneos la respuesta solo depende de la distancia $r - r'$ mientras el tiempo es una variable continua, por lo que la ecuación 1.1 se reduce:

$$D_i(r, t) = \int \int \bar{\epsilon}_{ij}(r - r', t - t') E_j(r', t') dt' dr' \quad (1.2)$$

La respuesta es lineal por lo que el vector desplazamiento D es proporcional al campo eléctrico aplicado E (la respuesta ocurre a la misma frecuencia del campo). En el caso de un campo eléctrico E oscilante :

$$E(r, t) = E_0 e^{i(q \cdot r - \omega t)} \quad (1.3)$$

Podemos escribir el desplazamiento eléctrico D en términos de la frecuencia usando transformadas de Fourier, entonces seria:

$$D_i(q, \omega) = \bar{\epsilon}_{ij}(q, \omega) E_j(q, \omega) \quad (1.4)$$

Con el tensor dieléctrico complejo dado por un vector de onda q y frecuencia ω .

Por ahora solo se manejaran redes cubicas por lo que el tensor dieléctrico sera una cantidad compleja $\hat{\epsilon}$ que llamaremos función dieléctrica. Además también la respuesta de los solidos puede estar descrita en términos de una corriente en la posición r y en el tiempo t y así:

$$J(r, t) = \int \int \hat{\sigma}(r, r', t, t') E(r', t') dt' dr' \quad (1.5)$$

Con el tensor conductividad complejo $\sigma(q, \omega)$ en respuesta a campos eléctricos sinusoidales variantes en el tiempo. De las ecuaciones de Maxwell estas dos funciones de respuesta están relacionadas entre si por:

$$\hat{\epsilon}(q, \omega) = 1 + 4\pi i \omega \hat{\sigma}(q, \omega) \quad (1.6)$$

Excepto para algunos casos la variación espacial de estas cantidades es idéntica:

$$J(r) E(r) = \hat{\sigma} \quad (1.7)$$

y con:

$$D(r) E(r) = \hat{\epsilon} \quad (1.8)$$

Dos cantidades espacialmente independientes. Esto quiere decir que las transformadas de Fourier de $\hat{\epsilon}$ y $\hat{\sigma}$ no tienen componentes $q \neq 0$. Existen excepciones a cantidades en otras escalas de longitud pero usando estas restricciones se puede escribir cantidades escalares independientes de q :

$$\hat{\sigma}(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega) \quad (1.9)$$

$$\hat{\epsilon}(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (1.10)$$

Entonces en la función dieléctrica y conductividad eléctrica estaría contenida la información sobre la respuesta de los materiales a campos eléctricos.

La dependencia en la frecuencia es llamada dispersión y de consideraciones que involucran causalidad la

parte real e imaginaria de las funciones de respuesta en óptica están vinculadas entre si por las relaciones Kramers Kronig y en el caso de la función dieléctrica son:

$$\varepsilon_1(w) - 1 = \frac{2}{\pi} \wp \int_0^\infty \frac{x \varepsilon_2(w)}{x^2 - w^2} dx \quad (1.11)$$

$$\varepsilon_2(w) = \frac{-2w}{\pi} \wp \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(w)}{x^2 - w^2} dx + \frac{4\pi\sigma_{dc}}{w} \quad (1.12)$$

Donde σ_{dc} es la conductividad dc, y el símbolo \wp es el valor principal de la integral de Cauchy. Existen maneras experimentales de extraer ε_1 y ε_2 directamente de un experimento como es el caso de elipsometría. Pero existen otros experimentos que utilizan las relaciones Kramers Kronig para extraer información del espectro, como es el caso del análisis Kramers Kronig al espectro de reflectividad por radiación a incidencia normal. La idea de este método es el siguiente. Primero las ecuaciones 1.11 y 1.12 no pueden ser aplicadas directamente ya que ε_1 y ε_2 dependen de una fase desconocida ϕ dada por reflectividad compleja [1]

$$r(w) = \frac{1 - \sqrt{\varepsilon(w)}}{1 + \sqrt{\varepsilon(w)}} = \sqrt{R(w)} \exp\{i\phi(w)\} \quad (1.13)$$

Se puede escribir una relación similar a 1.9 con respecto a la función de reflectividad compleja [1]:

$$\ln \hat{r}(w) = \ln \sqrt{R(w)} + i\phi(w) \quad (1.14)$$

De esta forma podemos escribir la relación 1.12 y usarla para calcular $\phi(w)$ a partir de $R(w)$.

$$\phi(w) = \frac{-2w}{\pi} \wp \int_0^\infty \frac{\ln \sqrt{R(x)}}{x^2 - w^2} dx + \phi(0) \quad (1.15)$$

Habiendo encontrado la fase ϕ es posible invertir la ecuación 1.13, y así determinar la conductividad compleja y la función dieléctrica: [2]

$$\sigma_1(w) = \frac{w}{4\pi} \varepsilon_2(w) = \frac{w}{4\pi} \frac{4\sqrt{R(w)}[1 - R(w)] \sin \phi_r}{[1 + R(w) - 2\sqrt{R(w)} \cos \phi_r]^2} \quad (1.16)$$

$$\sigma_2(w) = \frac{w}{4\pi} [1 - \varepsilon_1(w)] = \frac{w}{4\pi} \left(1 - \frac{[1 - R(w)]^2 - 4R(w) \sin^2 \phi_r}{[1 + R(w) - 2\sqrt{R(w)} \cos \phi_r]^2} \right) \quad (1.17)$$

Desafortunadamente este tratamiento basado en ecuaciones como 1.15 no es universal. Se ha demostrado que estas relaciones se mantienen para el caso de incidencia normal a la superficie pero dejan de cumplirse por ejemplo para la reflectividad fuera del ángulo normal a la superficie, y el mismo problema ocurre para otros casos. Por lo que es mejor tener desde el punto de vista práctico una formulación más general que pueda ser usado para diferentes configuraciones experimentales sin mayor adaptación [1].

1.3. Objetivo General

- Desarrollar una aplicación web innovadora que permita el modelado preciso de la función dieléctrica mediante el análisis variacional Kramers-Kronig restringido de cantidades ópticas medibles.

1.4. Objetivos Específicos

- Implementar algoritmos para el análisis variacional Kramers-Kronig restringido, permitiendo la obtención precisa de la función dieléctrica a partir de datos ópticos medibles.
- Incorporar prácticas de programación de vanguardia para garantizar la eficiencia, la robustez y la escalabilidad de la aplicación web.
- Integrar tecnologías de inteligencia artificial para optimizar el procesamiento y análisis de los resultados obtenidos a través del análisis variacional.
- Diseñar e implementar una interfaz de usuario interactiva que ofrezca una experiencia óptima en la visualización y manipulación de datos ópticos y resultados del análisis.

1.5. Justificación e Importancia del Proyecto

Los resultados obtenidos experimentalmente en espectroscopia son muy útiles en la caracterización de materiales permitiendo determinar la naturaleza del material y posibles aplicaciones. Dependiendo rango de frecuencia con que se esta estudiando una muestra de material se puede obtener información sobre la estructura de bandas electrónica o fonónicas del material. Por ejemplo si se hacen mediciones de reflectancia a incidencia normal en el rango de frecuencia infrarrojo la obtención de la función dieléctrica permite estudiar la estructura fononica y así los niveles energéticos de los materiales[3].

Es importante toda la serie de propiedades ópticas que se desprenden de la función dieléctrica como el índice de refracción que esta determinado por el cambio de la velocidad de la onda en el medio y coeficiente de extinción que describe la absorción de la onda en el medio, ambos coeficientes determinan la propagación de la onda electromagnética en el medio. El modelado de la función dieléctrica a partir del análisis variacional Kramer-Kronig restringido es un enfoque que ignora el uso de modelos(Drude Lorentz, Fano, Tauc-Lorentz etc.) para ajustarse al tipo de datos, en vez de eso es una técnica que se adapta prácticamente a cualquier tipo de medición óptica.

Por medio de una aplicación web los investigadores podrán acceder rápidamente a una herramienta capaz de modelar la función dieléctrica a partir de cualquier cantidad del espectro óptico de los materiales que describa fenómenos físicos causales en óptica y que cumplan con las relaciones Kramers Kronig de forma rápida y en tiempo real. La construcción de una aplicación multi-plataforma tendrá múltiples ventajas como la compatibilidad y la portabilidad ya que se puede acceder desde cualquier dispositivo y evita el uso de los recursos del sistema del usuario, que por el contrario en el caso de los programa de escritorio la velocidad de respuesta del programa dependerá de las características propias de cada computador.

1.6. Alcances y Limitaciones

El desarrollo de la aplicación web para el modelado de la función dieléctrica mediante el análisis variacional Kramers-Kronig restringido representa un avance significativo en la capacidad de análisis de

materiales mediante técnicas ópticas. Los alcances de esta herramienta incluyen su aplicabilidad a una amplia gama de materiales y estructuras, abarcando desde sólidos cristalinos a materiales amorfos. Además, al incorporar las relaciones Kramers-Kronig, la aplicación permite el análisis de materiales en múltiples escalas, desde nanomateriales hasta sistemas a granel, lo que lo hace potencialmente útil para una amplia variedad de investigadores en diferentes ámbitos científicos. Sin embargo, dada la naturaleza de las relaciones Kramers-Kronig, es crucial destacar que la técnica solo es aplicable a funciones que cumplen con estas relaciones, lo que puede limitar su uso en ciertos casos de materiales no lineales o sistemas fuera del equilibrio termodinámico.

Es importante tener en cuenta que los datos experimentales requeridos para la aplicación deben cubrir un amplio rango de frecuencias, lo que puede suponer una limitación en términos de los equipos y métodos experimentales disponibles. Asimismo, la eficacia de la herramienta está estrechamente ligada a la calidad y la precisión de los datos ópticos obtenidos experimentalmente. Por ende, la interpretación y la fiabilidad de los resultados estarán condicionadas por la calidad de los datos de entrada. Otra limitación importante es que, si bien la aplicación web se enfocará en ofrecer un modelado preciso de la función dieléctrica, no reemplazará la necesidad de comprensión y expertise en el análisis de materiales y espectroscopía óptica. Los usuarios deberán poseer conocimientos sólidos en estas áreas para interpretar adecuadamente los resultados proporcionados por la herramienta. Esta limitación destaca la complementariedad del enfoque propuesto y la necesidad de un abordaje integral en la caracterización de materiales mediante espectroscopía óptica.

Por último, vale la pena mencionar que las limitaciones en el desarrollo de la aplicación podrían incluir restricciones técnicas o de recursos, como la disponibilidad de capacidades de cómputo intensivo para el procesamiento de grandes conjuntos de datos ópticos, así como posibles desafíos asociados con la integración efectiva de tecnologías de inteligencia artificial para el análisis de resultados. Estas limitaciones técnicas podrían requerir consideraciones adicionales en el diseño y desarrollo de la aplicación, así como fomentar la colaboración interdisciplinaria con expertos en ciencia de datos e inteligencia artificial. Además, es importante tener en cuenta la necesidad de un diseño de interfaz de usuario intuitivo, que garantice la accesibilidad y usabilidad efectiva para un público diverso de investigadores, lo que podría plantear desafíos adicionales en términos de diseño y desarrollo de la aplicación web [4].

1.7. Metodología

Actualmente existen una gran variedad de metodologías para desarrollar programas basadas en enfoques generales que han ido evolucionando. En nuestro caso utilizaremos la metodología en Cascada considerada como una de las más antiguas y su nombre se debe al lineamiento de procesos para hacer funcionar el sistema. Veamos cuáles son sus fases de desarrollo:[5]

- **Análisis y definición de requerimientos:** Los servicios, restricciones y metas del sistema son definidas a partir de consultas con los científicos.
- **Diseño del Programa:** Se establece la arquitectura del sistema. Aquí se identifican las abstracciones fundamentales de la aplicación Web y sus relaciones.
- **Diseño Algorítmico y Codificación:** En esta fase es momento de escribir el código necesario de la aplicación Web.
- **Integración y Verificación del Sistema:** Los programas o unidades son integradas como un sistema

completo para asegurar que se cumplan con los requerimientos del programa. Después de las pruebas, el sistema es entregado al cliente.

- **Funcionamiento y Mantenimiento:** Por lo general esta fase es la mas larga del ciclo de vida. El sistema se instala y se pone en funcionamiento practico. El mantenimiento implica corregir errores no descubiertos en las etapas anteriores del ciclo de vida, mejorar la implementación de las unidades del sistema y resaltar los servicios del sistema una vez que se descubren nuevos requerimientos.

Capítulo 2

MARCO TEORICO

2.1. Antecedentes

Durante las últimas décadas, se ha observado un notable desarrollo de programas de escritorio diseñados para el análisis del espectro óptico de sólidos, destacando herramientas como OPTPAL y, más recientemente, RefFit, desarrollado por Alexey Kuzmenko. Este último, en particular, se ha consolidado como un software potente, compacto e interactivo diseñado para modelar el espectro óptico a partir de mediciones de reflectividad, transmisión, elipsometría, entre otras variables fundamentales en la caracterización óptica de materiales. RefFit se distingue por su versatilidad al utilizar modelos de funciones dieléctricas como el Drude-Lorentz, Fano, Tauc-Lorentz, entre otros, facilitando así la construcción de una rica biblioteca de modelos. Este software, con su motor basado en el algoritmo de Levenberg-Marquardt, permite el ajuste manual o automático de varios conjuntos de datos de diferentes tipos, representando un avance significativo en el análisis y modelado del espectro óptico de sólidos[3].

Esta evolución en el desarrollo de herramientas de análisis de espectros ópticos ha demostrado su importancia tanto a nivel académico como en la investigación aplicada, proporcionando a científicos e ingenieros la capacidad de explorar y comprender las propiedades ópticas de materiales en diversas aplicaciones. Sin embargo, a pesar de los avances logrados, existen desafíos y limitaciones en la capacidad de estos programas para ofrecer un modelado completo y una experiencia de usuario óptima, lo que motiva la necesidad de explorar nuevas metodologías y herramientas que puedan superar estas limitaciones y brindar un enfoque más integral para el análisis del espectro óptico de sólidos.

2.2. Espectro Optico

Con espectro óptico nos referiremos a cantidades que dependen de frecuencias y que están totalmente determinadas por la función dieléctrica del material estudiado, un ejemplo de ellas es la reflectancia $R(w)$ la cual puede ser medida directamente y otra es la conductividad óptica $\sigma(w)$ la cual usualmente no es medida directamente pero es derivada por medio de algún análisis.

Para deducir estas cantidades se deben utilizar las ecuaciones de Maxwell y sus soluciones para campos eléctricos y magnéticos variantes en el tiempo. Se vera que a partir de las ecuaciones de Maxwell se pueden describir las propiedades de propagación de ondas electromagnéticas cuando la luz interacciona con la materia. Pero primero estudiemos el caso de radiación electromagnética que se propaga en el vacío donde las ecuaciones de Maxwell toman la siguiente forma[2]:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(r, t) = 4\pi\rho(r, t) \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(r, t) = 0 \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(r, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}(r, t)}{\partial t} = 0 \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}(r, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}(r, t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{J}(r, t) \quad (2.4)$$

Donde \vec{E} es la fuerza del campo eléctrico, \vec{B} es la densidad de flujo magnético, ρ es la densidad de carga, \vec{J} es la densidad de corriente, y $c = 2,99792458m/s$ es la velocidad de la luz en el vacío. La ecuación 2.1 es conocida como la ley de Gauss para campos eléctricos, la ecuación 2.2 como la ley de Gauss para campos magnéticos, 2.3 como la inducción de Faraday y 2.4 como la ley de Ampère [2].

En la presencia de un medio los campos eléctricos y magnéticos pueden generar dipolos eléctricos y magnéticos, polarizar cargas e inducir corrientes. El campo eléctrico y magnético no serán uniformes dentro del material y fluctuarán de un punto a otro reflejando la periodicidad de la red atómica. Estos campos serán diferentes comparados a que estuviesen en el vacío, por lo que consecuentemente se usa el desplazamiento eléctrico D en vez de la fuerza del campo eléctrico E , y la inducción magnética B con la fuerza del campo magnético H para tomar las modificaciones creadas por el medio.

La densidad de carga total $\rho = \rho_{total}$ usada en la ley de Gauss 2.1 en presencia del medio tendrá dos términos. Para longitudes de onda apreciablemente mas grandes que el espaciamento inter-atómico se puede considerar un valor promedio para las densidades de carga ($\rho_{externo}$), para los que no, habrá una contribución debido a la polarización debido al medio ($\rho_{polarizado}$):

$$\rho_{total} = \rho_{externa} + \rho_{polarizacion} \quad (2.5)$$

con:

$$\rho_{polarizacion} = -\nabla \cdot P \quad (2.6)$$

Ahora asumiendo que no hay corrientes externas presentes $J_{externa} = 0$. La densidad total de corriente $J = J_{total}$ de las ecuaciones de Maxwell consiste de una contribución $J_{conduccion}$ que surge del movimiento de electrones presentes en el campo eléctrico y de una contribución $J_{ligados}$ debido a la redistribución de cargas ligadas:

$$J_{total} = J_{conduccion} + J_{ligados} \quad (2.7)$$

Por medio de la ley de ohm, se puede relacionar las corrientes de conducción $J_{conduccion}$ con la conductividad del material σ_1 y el campo eléctrico aplicado [6]:

$$J_{conduccion} = \sigma_1 \vec{E} \quad (2.8)$$

También se asumirá que no debe haber cambios debido a campos magnéticos ya que no estamos considerando efectos magnéticos.

La polarización dependiente del tiempo $\partial P/\partial t$ y dependencia espacial de la magnetización $\nabla \times M$ contribuirían a lo que es llamado desplazamiento de corriente para cargas ligadas $J_{ligados}$. Ahora incluyendo estas consideraciones explícitamente en la ecuación de Maxwell 2.3(inducción de Faraday) se convierte:

$$\nabla \times B(r, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial E(r, t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} J_{total}(r, t) = \frac{4\pi}{c} [J_{conduccion}(r, t) + \frac{\partial P(r, t)}{\partial t} + c \nabla \times M(r, t)] \quad (2.9)$$

y la ecuación 2.1 cambia a :

$$\nabla \cdot E(r, t) = 4\pi \rho_{total}(r, t) = 4\pi [\rho_{externo} - \nabla \cdot P(r, t)] \quad (2.10)$$

Estas nuevas formulaciones de las ecuaciones de Maxwell requieren la definición del desplazamiento eléctrico D y la fuerza del campo magnético H .

$$D_i(r, t) = \int \int \bar{\epsilon}_{ij}(r - r'; t - t') E_j(r', t') dt' dr' \quad (2.11)$$

Donde i y j se refieren a las componentes del campo eléctrico E y desplazamiento eléctrico D . El termino $\bar{\epsilon}_{ij}$ es llamado tensor dieléctrico complejo.

Ahora si asumimos que la respuesta sera a la misma frecuencia del campo eléctrico aplicado (respuesta lineal) y un medio isotropico (propiedades idénticas en todas direcciones), debido a esto el tensor dieléctrico $\bar{\epsilon}$ sera una cantidad escalar que se llama constante dieléctrica ϵ_1 . La fuerza del campo eléctrico E y el desplazamiento eléctrico D (o densidad de flujo eléctrico) están conectados por la constante dieléctrica(o permitividad) ϵ_1 :

$$\vec{D}(r, t) = \epsilon_1(r, t) \vec{E}(r, t) = (1 + 4\pi\chi_e(r, t)) \vec{E}(r, t) = \vec{E}(r, t) + 4\pi \vec{P}(r, t) \quad (2.12)$$

Con $\vec{P}(r, t) = \chi_e(r, t) \vec{E}(r, t)$, donde \vec{P} es la polarización inducida y χ_e es la susceptibilidad dieléctrica del medio y ϵ_1 es la constante dieléctrica. La constante dieléctrica puede ser tanto positiva o negativa.

Similarmente la fuerza magnética del campo H esta conectado con la inducción magnética B mediante la permeabilidad μ_1

$$\vec{B}(r, t) = \mu_1(r, t) \vec{H}(r, t) = (1 + 4\pi\chi_m(r, t)) \vec{H}(r, t) = \vec{H}(r, t) + 4\pi \vec{M}(r, t) \quad (2.13)$$

Donde χ_m es la susceptibilidad magnética y $M = \chi_m H$ es la magnetización. Las cantidades $\epsilon_1, \chi_e, \mu_1$ y χ_m que están conectadas con los campos son sin unidades. La susceptibilidad magnética χ_m es típicamente cuatro o cinco ordenes de magnitud mas pequeña que la susceptibilidad eléctrica χ_e , por esta razón se tomara $\mu_1 = 1$ ya que las propiedades magnéticas pueden ser ignoradas (excepto en ferro-magnetismo).

Ahora se definirán los coeficientes ópticos que caracterizan la propagación y disipación de la onda electromagnética en un medio material como la constante dieléctrica y la conductividad óptica y también coeficientes ópticos a mayor escala como el índice de refracción y el coeficiente de extinción. Luego se discutirá el fenómeno que ocurre en la interfaz del espacio vacío y la materia(o en general entre dos medios con diferentes constantes ópticas), esto llevara a la obtención de coeficientes ópticos accesibles experimentalmente como la reflectividad y la transmisión óptica. [6].

Utilizando estas definiciones se pueden reescribir las ecuaciones de Maxwells en presencia de materia [2].

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(r, t) = 4\pi \rho(r, t) \quad (2.14)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(r, t) = 0 \quad (2.15)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(r, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}(r, t)}{\partial t} = 0 \quad (2.16)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(r, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}(r, t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{J}(r, t) \quad (2.17)$$

La introducción de constantes ópticas a partir de estas ecuaciones ayudaran a describir la polarización del medio debido a fuentes electromagnéticas a mayores escalas que solo tamaños atómicos, así las constantes ópticas facilitan la descripción de la interacción de ondas electromagnética y la materia [2].

Utilizando la ley de Ohm 2.8, y 2.12 podemos reescribir 2.17 como [6]:

$$c \vec{\nabla} \times \vec{H}(r, t) = \sigma_1(r, t) \vec{E}(r, t) + \frac{\partial \vec{D}(r, t)}{\partial t} \quad (2.18)$$

Queremos que la dependencia en el tiempo sea armónica por lo que se toma $\partial D / \partial t = -iwD$ quedando [6]:

$$c \vec{\nabla} \times \vec{H}(r, t) = 4\pi\sigma_1(r, t) \vec{E}(r, t) - iw\varepsilon_1(r, t) \vec{E}(r, t) = -iw\hat{\varepsilon}(r, t) \vec{E}(r, t) \quad (2.19)$$

Derivando así la función dieléctrica compleja como una respuesta del material a los cambios de polarización debido a la radiación electromagnética.

$$\hat{\varepsilon}(r, t) = \varepsilon_1(r, t) + i \frac{\sigma_1(r, t)}{w} = \varepsilon_1(r, t) + i\varepsilon_2(r, t) \quad (2.20)$$

Ahora definida la función dieléctrica compleja se relacionara con las propiedades de propagación de la onda en el medio material. Para ello primero se utiliza la identidad vectorial [2] :

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}(r, t)) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(r, t)) - \nabla^2 \vec{E}(r, t)$$

Junto con las ecuaciones 2.16 y 2.14 se puede separar las componentes eléctricas y magnéticas [6] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\vec{\nabla} \times \vec{B}(r, t)) = \nabla^2 \vec{E}(r, t) - \vec{\nabla} \left(\frac{\rho(r, t)}{\varepsilon_1(r, t)} \right) \quad (2.21)$$

Si se utiliza las ecuaciones 2.12, 2.8 y 2.13 en la ecuación de Maxwell 2.17 se obtiene [6]:

$$\nabla \times \vec{B}(r, t) = \varepsilon_1(r, t) \mu_1(r, t) \frac{\partial \vec{E}(r, t)}{\partial t} + \sigma_1(r, t) \mu_1(r, t) \vec{E}(r, t) \quad (2.22)$$

Combinando las ecuaciones 2.21 y 2.22 y además suponiendo que no hay fuentes eléctricas $\rho = 0$, se determinan las ecuaciones para campos eléctricos y de manera similar para el campos magnéticos propagándose en presencia de materia [6]:

$$\nabla^2 \vec{E}(r, t) = \varepsilon_1(r, t) \mu_1(r, t) \frac{\partial^2 \vec{E}(r, t)}{\partial t^2} + \sigma_1(r, t) \mu_1(r, t) \frac{\partial \vec{E}(r, t)}{\partial t} \quad (2.23)$$

$$\nabla^2 \vec{H}(r, t) = \varepsilon_1(r, t) \mu_1(r, t) \frac{\partial^2 \vec{H}(r, t)}{\partial t^2} + \sigma_1(r, t) \mu_1(r, t) \frac{\partial \vec{H}(r, t)}{\partial t} \quad (2.24)$$

Una solución para estas ecuaciones considerando un medio infinito para obviar efectos de borde tenemos que para campos eléctricos y magnéticos [6]:

$$\vec{E}(r, t) = E_0 e^{i(\vec{q}(r, t) \cdot r - \omega t)} \quad (2.25)$$

$$\vec{H}(r, t) = H_0 e^{i(\vec{q}(r, t) \cdot r - \omega t - \phi(r, t))} \quad (2.26)$$

El factor ϕ indica que los campos eléctricos y magnéticos pueden estar en fases distintas, debido a que existe un medio material ($\sigma_1 \neq 0$). Como veremos a continuación el vector \vec{q} es una cantidad compleja, que describe la dependencia espacial de la onda y toma en cuenta la propagación y la atenuación de la onda [6]. Sustituyendo la solución 2.25 en la ecuación 2.23, encontramos la siguiente relación para q :

$$\vec{q}(r, t) = \frac{w}{c} [\varepsilon_1(r, t) \mu_1(r, t) + \frac{i 4 \pi \mu_1(r, t) \sigma_1(r, t)}{w}]^{1/2} \vec{n}_q \quad (2.27)$$

O lo que es lo mismo:

$$\vec{q}(r, t) = \frac{w}{c} \sqrt{\hat{\varepsilon}(r, t) \mu_1(r, t)} \vec{n}_q \quad (2.28)$$

Donde $n_q = q/|q|$ es un vector normal unitario en la dirección de \vec{q} . Un vector de onda \vec{q} es una forma compacta de expresar el hecho de que la onda se propaga en la dirección n_q , experimenta un cambio de frecuencia y una atenuación en el medio [6]. Por conveniencia a partir de este punto solo consideraremos medios homogéneos por lo que la dependencia espacial desaparece así como también es mejor describir la propagación en términos de una frecuencia w por lo que:

$$\vec{q}(w) = \frac{w}{c} [\varepsilon_1(w) \mu_1(w) + \frac{i 4 \pi \mu_1(w) \sigma_1(w)}{w}]^{1/2} \vec{n}_q \quad (2.29)$$

Los coeficientes ópticos del material como lo son $\varepsilon_1(w)$, $\sigma_1(w)$ y $\mu_1(w)$, determinan el comportamiento de la onda electromagnética de frecuencia w dentro del material. Los coeficientes ópticos como el índice de refracción (n) y el coeficiente de extinción (k) son utilizados para describir la propagación y disipación de la onda electromagnética en el medio a una escala macroscópica. Para describir las propiedades ópticas del medio, definimos el índice de refracción complejo como nueva función de respuesta. Entonces el valor del vector de onda $q = \hat{q} n_q$ se convierte:

$$\hat{q} = \frac{w}{c} \hat{N}(w) = \frac{w}{c} [n(w) + i k(w)] \quad (2.30)$$

$$\hat{N}(w) = n(w) + i k(w) = [\varepsilon_1(w) \mu_1(w) + \frac{4 \pi \mu_1(w) \sigma_1(w)}{w}]^{1/2} = [\hat{\varepsilon}(w) \mu_1(w)]^{1/2} \quad (2.31)$$

Las cantidades n y k son llamadas constantes ópticas del sólido, donde n es el índice de refracción y esta determinado por la propagación de la onda y k es el coeficiente de extinción que describe la atenuación

de la onda. Podemos relacionar la función dieléctrica con estas constantes ópticas de la siguiente forma:

$$\varepsilon_1(w) = n(w)^2 - k(w)^2 \quad (2.32)$$

$$\varepsilon_2(w) = 2n(w)k(w) \quad (2.33)$$

Se pueden relacionar el índice de refracción y el coeficiente de extinción con la conductividad eléctrica como [6]:

$$n(w) = \left\{ \frac{\mu_1(w)}{2} \left[\left(1 - \frac{4\pi\sigma_2(w)}{w} \right)^2 + \left(\frac{4\pi\sigma_1(w)}{w} \right)^2 \right]^{1/2} + \frac{\mu_1(w)}{2} - \frac{2\pi\mu_1(w)\sigma_2(w)}{w} \right\}^{1/2} \quad (2.34)$$

$$k(w) = \left\{ \frac{\mu_1(w)}{2} \left[\left(1 - \frac{4\pi\sigma_2(w)}{w} \right)^2 + \left(\frac{4\pi\sigma_1(w)}{w} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{\mu_1(w)}{2} + \frac{2\pi\mu_1(w)\sigma_2(w)}{w} \right\}^{1/2} \quad (2.35)$$

Estas importantes relaciones contienen toda la información sobre la propagación de la onda electromagnética en el material. Mas adelante se vera que la parte real y imaginaria de \hat{N} , $\vec{\varepsilon}$, y $\vec{\sigma}$ no son independientes y están conectadas por la causalidad expresada a través de las relaciones Kramers-Kronig.

La propagación del rayo a través del medio esta descrito por el índice de refracción(n), y esta definido como la relación de la velocidad de la luz en el vacío c y la velocidad de la luz en el medio v de acuerdo a: [7]

$$n = \frac{c}{v} \quad (2.36)$$

El índice de refracción depende de la frecuencia del rayo de luz. Este efecto es llamado dispersión y sera discutido mas adelante. En materiales transparentes como el vidrio la dispersión es pequeña en la región del espectro visible [7].

La absorción de la luz en un medio óptico es cuantificado por el coeficiente de absorción (α). Si el rayo se propaga en la dirección z , y la intensidad(poder óptico por unidad de area) en la posición z es $I(z)$ entonces el decaimiento de intensidad en una muestra de material de grosor dz esta dado por:

$$dI = -\alpha dz \times I(z) \quad (2.37)$$

Integrando obtenemos la ley de Beer:

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z} \quad (2.38)$$

Donde I_0 es la intensidad óptica en $z=0$. El coeficiente de absorción es una función que depende de la frecuencia, ya que los materiales absorben unos colores pero otros no. El coeficiente de absorción es directamente proporcional al coeficiente de extinción [7]:

$$\alpha = \frac{2kw}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda} = \frac{4\pi\sigma_1\mu_1}{nc} \quad (2.39)$$

Donde λ es la longitud de la onda propagándose en el vacío.

Si un medio es débilmente absorbente, entonces podemos asumir que k es muy pequeño, así que se pueden tomar [7]:

$$n = \sqrt{\varepsilon_1} \quad (2.40)$$

$$k = \frac{\varepsilon_2}{2n} \quad (2.41)$$

2.3. Clasificación de los procesos ópticos

El amplio rango de propiedades ópticas observadas en el estado solido pueden ser clasificadas en la reflexión, propagación y transmisión de la luz, en la figura 2.3 se ilustra un rayo de luz que viaja de un medio material (N') y luego incide con otro medio material finito (N).

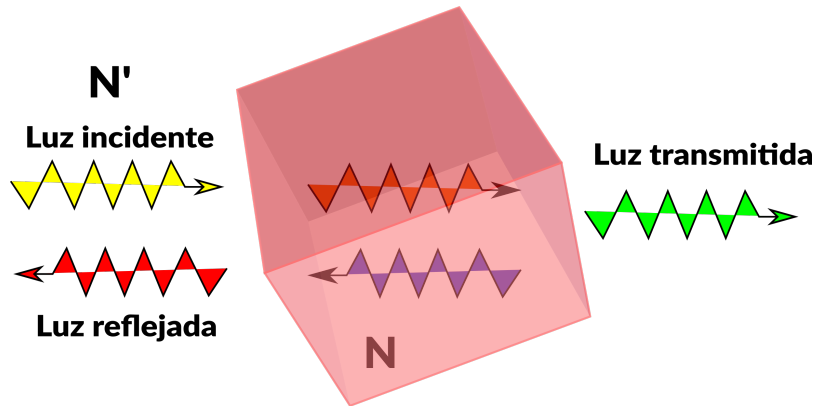


Figura 2.3. Procesos ópticos.

Una parte de la luz es reflejada en la superficie, mientras que el resto se propaga a través del medio y luego cuando el alcanza el final del medio la luz es reflejada y transmitida nuevamente debido al cambio de interfaces. Entonces la cantidad de luz que al final es transmitida esta relacionada con las ondas reflejadas y también en la manera en que la luz es dispersada y absorbida a medida que atraviesa el medio material. Describiendo un poco mejor estos fenómenos [7]:

- La refracción es el cambio de dirección que experimenta la luz cuando atraviesa la interfaz de dos medios. El cambio en la dirección es consecuencia de un cambio en la velocidad del rayo de luz cuando interactúa con un medio de propiedades ópticas distintas. La refracción en si mismo no afecta la intensidad de la luz que se propaga [7].
- La absorción ocurre durante la propagación si la frecuencia de la luz que se propaga es resonante con la frecuencia de transición de los átomos en el medio, como consecuencia el rayo sera atenuado en el proceso. Las transmisiones de luz en el medio esta claramente relacionado con la absorción, porque solo la luz que no es absorbida sera transmitida. Las absorciones son responsables de la coloración de muchos materiales ópticos. Como por ejemplo los rubíes, son rojos porque absorben luz en frecuencias del azul y verde pero no rojo [7].
- La dispersión es fenómeno en el cual la luz cambia de dirección y posiblemente también de frecuencia luego de interactuar con el medio. El numero total de fotones que viajan en la dirección de propagación disminuye, debido a que la luz es redirigida en otras direcciones. La dispersión sin embargo tiene

el mismo efecto de atenuación en la intensidad de la onda que en la absorción. Entonces, sera inelastica si la frecuencia de la luz dispersada no cambia y elástica si la frecuencia cambia en el proceso [7].

- La luminiscencia es el nombre que se le da al proceso de emisión espontánea de la luz por átomos excitados en el estado solido y puede ocurrir durante la absorción. La luz re-emitida sera en todas las direcciones y tendrá una frecuencia diferente a la de la luz absorbida. En realidad la luminiscencia no ocurre en el instante en que se produce la absorción, toma una cantidad de tiempo característica emitir luz por emisión espontánea. Esto significa que los átomos excitados pueden disipar energía como calor antes de que ocurra la emisión de luz.[7].

Estos fenómenos que pueden ocurrir cuando la luz se propaga a través del medio y están descritos por el campo de óptica lineal, ya que si la intensidad de la luz es muy alta, estarían descritos por la óptica no lineal. Un ejemplo seria el duplicamiento de frecuencias, en el cual la frecuencia incidente se duplica cuando interactúa con el medio.

2.4. Configuración experimental de radiación a incidencia normal a la superficie de una muestra

Muchas de las técnicas de medición en óptica involucran la radiación a incidencia normal la cual se ilustra en la figura 2.4.

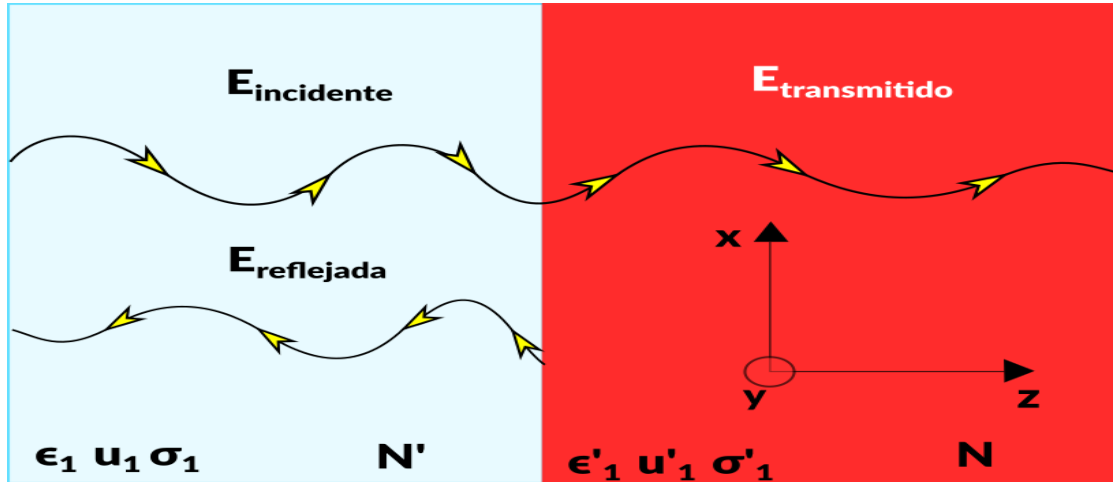


Figura 2.4. Reflectividad a incidencia normal.

Asumiremos que el solido es lo suficientemente delgado para ignorar reflexiones internas [?]. Ahora la siguiente pregunta sera como cambia la propagación de la onda electromagnética cuando pasa de estar en un medio de espacio vacío a un medio material. Consideremos la propagación de un plano de onda electromagnético que viene desde el vacío ($\epsilon'_1 = \mu'_1 = 1, \sigma'_1 = 0$) y pasa a través de un medio de material con $\mu_1 = 1$ y ϵ_1, σ_1 finitos, la onda sera atenuada dentro del material.

La superficie se encuentra en el plano XY, mientras que el eje Z positivo esta en la dirección normal hacia la superficie descrito por el vector unitario n_s . Por lo que la dirección de propagación de la onda estaría en el plano XZ como se muestra en la figura.

El campo eléctrico y magnético transmitido dentro del solido esta dado por:

$$\vec{E}_{xt}(z, t) = E_{0t} e^{i(\vec{q}_i \cdot \vec{z} - \omega t)} \quad (2.42)$$

$$\vec{H}_{yt}(z, t) = E_0 t e^{i(\vec{q}_i \cdot z - wt)} \quad (2.43)$$

Con el vector de onda dado por $\vec{q}_i = \frac{w}{c} \hat{N}$ Por otro lado en el espacio vacío tenemos una onda incidente y una reflejada dadas por:

$$\vec{E}_{xi}(z, t) = E_i e^{i(\frac{wz}{c} - wt)} + E_r e^{i(\frac{-wz}{c} - wt)} \quad (2.44)$$

$$\vec{H}_{yi}(z, t) = E_i e^{i(\frac{wz}{c} - wt)} - E_r e^{i(\frac{-wz}{c} - wt)} \quad (2.45)$$

En la interfaz de los dos medios las componente de E_{xi} y H_{yi} deben ser continuas en la superficie, esto implica que se cumpla:

$$E_t = E_i + E_r \quad (2.46)$$

$$H_t = H_i - H_r \quad (2.47)$$

De la ecuación de Maxwell(ley de Faraday) 2.16 se tiene:

$$\nabla \times \vec{E}(r, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}(r, t)}{\partial t} = \frac{iw}{c} \vec{H}(r, t) \quad (2.48)$$

Que en este caso resulta:

$$\frac{\partial \vec{E}(r, t)_x}{\partial z} = \frac{iw}{c} \vec{H}(r, t)_y \quad (2.49)$$

Combinando la ecuación 2.49 con 2.42 y 2.45 se llega a:

$$E_t \vec{q}_t = E_i \frac{w}{c} - E_r \frac{w}{c} = E_0 \frac{w}{c} \hat{N} \quad (2.50)$$

O también lo que es lo mismo:

$$E_i - E_r = E_t \hat{N} \quad (2.51)$$

Combinando la ecuación 2.51 y 2.46 se obtiene el coeficiente de reflexión complejo como nueva función de respuesta ya que relaciona la radiación reflejada e incidente:

$$\hat{r} = \frac{E_r}{E_i} = \frac{1 - \hat{N}}{1 + \hat{N}} = |\hat{r}| e^{i\phi_r} = \sqrt{\frac{I_r}{I_i}} e^{i\phi_r} = \sqrt{R} e^{i\phi_r} \quad (2.52)$$

Durante el experimento la reflectancia R es medida y la información del cambio de fase de la onda se pierde ya que se esta midiendo el modulo de $|\hat{r}| = R$.

$$R = \frac{|E_r|^2}{|E_i|^2} = |\hat{r}|^2 = \left| \frac{1 - \hat{N}}{1 + \hat{N}} \right|^2 = \frac{(1 - n)^2 + k^2}{(1 + n)^2 + k^2} \quad (2.53)$$

El cambio de fase de la onda estará dada por:

$$\tan \phi_r = \frac{-2k}{1 - n^2 - k^2} \quad (2.54)$$

La conductividad compleja y la función dieléctrica pueden definirse en términos de la reflectancia y el

cambio de fase como:

$$\sigma_1(w) = \frac{w}{4\pi} \varepsilon_2(w) = \frac{w}{4\pi} \frac{4\sqrt{R(w)}[1 - R(w)]\sin\phi_r}{[1 + R(w) - 2\sqrt{R(w)\cos\phi_r}]^2} \quad (2.55)$$

$$\sigma_2(w) = \frac{w}{4\pi} [1 - \varepsilon_1(w)] = \frac{w}{4\pi} \left(1 - \frac{[1 - R(w)]^2 - 4R(w)\sin^2\phi_r}{[1 + R(w) - 2\sqrt{R(w)\cos\phi_r}]^2}\right) \quad (2.56)$$

La transmisión \hat{t} también puede ser determinada para una onda electromagnética que atraviesa la superficie:

$$\hat{t} = \frac{E_t}{E_i} = \frac{2N'}{N + N'} = |\hat{t}|e^{i\phi_t} \quad (2.57)$$

Y el cambio de fase:

$$\phi_t = \arctan\left\{\frac{n - k}{n + k}\right\} \quad (2.58)$$

Este es el cambio de fase entre la onda incidente y la onda transmitida. Por lo que se puede definir la transmitancia como:

$$T = \frac{I_t}{I_i} = \sqrt{\varepsilon_1} \frac{|E_t|^2}{|E_i|^2} = \sqrt{\varepsilon_1} |\hat{t}|^2 = \frac{4n}{(n + 1)^2 + k^2} = 1 - R \quad (2.59)$$

La transmitividad en un medio absorbente de grosor l esta dado por [7]:

$$T = (1 - R_1)e^{-\alpha l}(1 - R_2) \quad (2.60)$$

Donde R_1 y R_2 son las reflectividades en el frente de superficie y la reflectividad al final del material. Si el frente del material y el fondo del material poseen la misma reflectividad, como es usual, entonces la ecuación anterior se puede simplificar [7]:

$$T = (1 - R)^2 e^{-\alpha l} \quad (2.61)$$

En materiales transparentes como los vidrios en el espectro de luz visible el coeficiente de absorción es muy pequeño. Por lo que en este rango se pueden despreciar k y ε_2 y por lo tanto el índice de refracción complejo y la función dieléctrica son tomados como números reales. Esta es la razón por la que en las tablas de propiedades generalmente solo las partes reales de la función dieléctrica y el índice de refracción complejo son mostrados [7].

2.5. Relaciones Kramers-Kronig

Los diferentes parámetros ópticos y constantes ópticas describen la respuesta del medio aplicando radiación electromagnética dentro del marco de la teoría de respuesta lineal, la dependencia de la frecuencia de la función de respuesta es llamada dispersión. La constante dieléctrica compleja ε y la conductividad σ pueden ser consideradas como las principales funciones de respuesta del material, describiendo la polarización eléctrica y corrientes inducidas en respuesta a campos eléctricos. El cambio de la onda electromagnética en el material también puede darse en términos del índice de refracción complejo \hat{N} y en términos de la impedancia Z_s , las cuales también son funciones de respuesta complejas. Por lo que

siempre se trata con funciones de respuesta complejas que describen la respuesta del sistema a estímulos, por lo que siempre habrá disipación y cambios de fase [6].

Consideraciones generales que involucran causalidad, son usados para derivar importantes relaciones entre la parte real y imagina de funciones de respuesta complejas. Estas fueron dadas por Kramers y Kronig y juegan un papel muy importante mas allá de la teoría de funciones de respuesta. Estas relaciones tienen también una gran importancia practica ya que permiten la evaluaciones de las componentes de la función dieléctrica compleja o conductividad, cuando solo un parámetro óptico como el poder reflejado, transmitido o absorbido es medido.

Para derivar estas relaciones, asumamos una respuesta lineal a una perturbación externa dada de la forma:

$$\hat{X} = \int \int_{-\infty}^{\infty} \hat{G}(r, r'; t, t') \hat{f}(r', t') dr' dt' \quad (2.62)$$

Esto describe la respuesta \hat{X} del sistema en el tiempo t y posición r a un estímulo \hat{f} en el tiempo t' y posición r' . La función $\hat{G}(r, r'; t, t')$ es llamada función de respuesta, y puede ser la conductividad, la constante dieléctrica, la susceptibilidad, o otra constante óptica como el índice de refracción. En nuestro caso el estímulo sera un onda electromagnética, también asumiremos que el medio es isotropico y homogéneo por lo que despreciaremos la dependencia espacial, así \hat{G} es un escalar. Y ya que el origen de la escala del tiempo no tiene importancia física, entonces $G(t, t')$ es una función de la diferencia de los argumentos $t - t'$, así lo que ocurre en un lugar particular depende solo de los campos existentes en el lugar. En lo que sigue despreciaremos la dependencia espacial de la perturbación externa, y nos restringiremos a una aproximación local. Entonces la respuesta en una posición particular r depende solo del campo en el cual existe en un lugar particular descrito por la función delta ($\delta(x) = 1$ si $x = 0$).

$$\hat{G}(r, r'; t, t') = \delta(r - r') \hat{G}(t - t') \quad (2.63)$$

Con las condiciones tomadas la ecuación 2.62 se convierte en:

$$\hat{X}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{G}(t - t') \hat{f}(t') dt' \quad (2.64)$$

Si el sistema es causal entonces para $t < t'$:

$$\hat{G}(t - t') = 0 \quad (2.65)$$

Lo cual básicamente significa que no habrá respuesta antes del estímulo y podemos escribir $\int_{-\infty}^{\infty} dt'$ a $\int_{-\infty}^t dt'$.

Es conveniente tratar con cantidades en el dominio de frecuencias. En el espacio de Fourier se pueden definir como [2]:

$$\hat{f}(w) = \int \hat{f}(t) \exp\{iwt\} dt \quad (2.66)$$

$$\hat{X}(w) = \int \hat{X}(t) \exp\{iwt\} dt \quad (2.67)$$

$$\hat{G}(w) = \int \hat{G}(t - t') \exp\{iw(t - t')\} dt \quad (2.68)$$

Por lo que la respuesta se puede escribir colocando 2.64 en 2.67 llevando a la convolución:

$$\begin{aligned}\hat{X}(w) &= \int dt \exp\{iwt\} [\int \hat{G}(t-t') \hat{f}(t') dt'] \\ &= \int dt' \hat{f}(t') \exp\{iwt'\} [\int \hat{G}(t-t') \exp\{iw(t-t')\} dt] \\ &= \hat{G}(w) \hat{f}(w)\end{aligned}\tag{2.69}$$

Así en el dominio de frecuencia la respuesta $X(w)$ es igual a la multiplicación de un estímulo monocromático $f(w)$ por un número $G(w)$, llamado susceptibilidad [2]. Generalmente \hat{G} es una cantidad compleja, con la componente real describiendo la amplitud de la respuesta y la parte imaginaria refleja la diferencia de fase entre el estímulo y la respuesta. Por razones matemáticas, se asume que la frecuencia que aparece en las ecuaciones anteriores es compleja, $\hat{w} = w_1 - iw_2$, entonces de la ecuación 2.68 sera:

$$\hat{G}(\hat{w}) = \int \hat{G}(t-t') \exp\{iw_1(t-t')\} \exp\{-w_2(t-t')\} dt \tag{2.70}$$

Esta integral puede ser evaluada usando el teorema de la integral de Cauchy. El factor $\exp[-w_2(t-t')]$ esta limitado por la parte superior del plano complejo para $t-t' > 0$ y abajo de la mitad del plano complejo para $t-t' < 0$. El requerimiento de casualidad requiere que sea evaluado sobre la mitad superior del plano complejo [6].

Si consideramos el contorno de un semicirculo cerrado como muestra la figura[x] con un pequeño bulto al rededor de la frecuencia w , del teorema de Cauchy se puede escribir:

$$\hat{G}(w) = \frac{1}{i\pi} \oint \frac{\hat{G}(\hat{w}')}{\hat{w}' - \hat{w}_0} d\hat{w}' = 0 \tag{2.71}$$

Ahora consideremos el caso limite cuando el radio del semicirculo tiende a infinito mientras que el radio del pequeño semicirculo al rededor de w_0 se aproxima a cero. Mientras que la integral sobre el largo el semicirculo desaparece como $\hat{G}(\hat{w}) \rightarrow 0$ cuando $\hat{w}' \rightarrow \infty$, la integral sobre el pequeño semicirculo de radio η puede ser evaluado usando $\hat{w}' = \hat{w}_0 - \eta \exp\{i\phi\}$, esta relación es aveces llamada identidad de Dirac:

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\eta} = \wp \left\{ \frac{1}{x} \right\} \mp i\pi \delta(x) \tag{2.72}$$

Por lo que obtenemos:

$$\lim_{n \rightarrow 0} \oint \frac{\hat{G}(\hat{w}')}{\hat{w}' - \hat{w}_0} d\hat{w}' = -i\pi \hat{G}(\hat{w}_0) \tag{2.73}$$

Esta integral a lo largo del eje real de frecuencia da el principal valor de P. Sin embargo:

$$\hat{G}(w) = \frac{1}{i\pi} \wp \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{G}(w')}{w' - w} dw' \tag{2.74}$$

Donde hemos omitido el índice w_0 . En la manera usual, la función de respuesta compleja $\hat{G}(w)$ puede estar escrita en términos de la parte real y imagina como $\hat{G}(w) = G_1(w) + iG_2$ llevando a la siguientes relaciones de dispersión entre las partes reales e imaginaria de la función de respuesta:

$$G_1(w) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_2(w')}{w' - w} dw' \tag{2.75}$$

$$G_2(w) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_1(w')}{w' - w} dw' \quad (2.76)$$

Notemos que 2.76 nos dice que si tenemos determinado $G_1(w)$ sobre todas las frecuencias entonces podemos encontrar $G_2(w)$. Así se puede observar que la parte real e imaginaria no son independientes pero están relacionada.

Usando estas relaciones podemos derivar varias expresiones conectando la parte real e imaginaria de diferentes parámetros ópticos y funciones de respuestas mencionados anteriormente. Para Aplicar estas relaciones a la constante dieléctrica compleja, se tiene la polarización P en respuesta a un campo eléctrico E aplicado lleva a un desplazamiento D dado por la ecuación 2.12 :

$$4\pi P(w) = [\varepsilon_1(w) - 1]E(w) \quad (2.77)$$

Consecuentemente $\varepsilon_1(w) - 1$ es la función de respuesta apropiada:

$$\varepsilon_1 - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{w' \varepsilon_2(w')}{(w')^2 - w^2} dw' \quad (2.78)$$

Para la parte imaginaria:

$$\varepsilon_2 = -\frac{2w}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(w')}{(w')^2 - w^2} dw' + \frac{4\pi\sigma_{dc}}{w} \quad (2.79)$$

Con σ_{dc} dado por:

$$\sigma_{dc} = \sigma_1(0) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} [1 - \varepsilon_1(w')] dw' \quad (2.80)$$

También pueden ser usadas para otras constantes ópticas que son funciones de respuesta como el índice de refracción compleja $N(w) = n(w) + ik(w)$ y están dadas por:

$$n(w) - 1 = \frac{2}{\pi} \wp \int_0^{\infty} \frac{w' k(w')}{(w')^2 - w^2} dw' \quad (2.81)$$

$$k(w) = \frac{-2}{\pi w} \wp \int_0^{\infty} \frac{(w')^2 [n(w') - 1]}{(w')^2 - w^2} dw' \quad (2.82)$$

Podemos escribir las relaciones de dispersión entre la amplitud $\sqrt{R} = |\hat{r}|$ y el cambio de fase ϕ_r de la onda reflejada fuera de la superficie de una muestra. Escribiendo $Ln\hat{r}(w) = \ln|\hat{r}(w)| + i\phi_r(w)$ las relaciones serán:

$$\ln|\hat{r}(w)| = \frac{1}{\pi} \wp \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\phi_r(w')}{w' - w} dw' \quad (2.83)$$

$$\phi_r(w) = -\frac{1}{\pi} \wp \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln|\hat{r}(w')|}{w' - w} dw' \quad (2.84)$$

2.6. Algoritmo Levenberg Marquardt

Este algoritmo es usado para resolver problemas de mínimos cuadrados no lineales, se basa en el balance auto-ajustable entre dos técnicas de minimización, el gradiente descendente y el inverso hessiano. El método del gradiente descendente es simplemente el movimiento de la curva en la dirección de descenso mas aguda la cual esta determinada por el gradiente [3]

$$\beta_k = \frac{-1}{2} \frac{\partial \chi^2}{\partial p_k} = \sum_{i=1}^N \frac{y_i - f(x, p_1, \dots, p_M)}{\sigma_i^2} \frac{\partial f}{\partial p_k}(x, p_1, \dots, p_M) \quad (2.85)$$

Supondremos que los parámetros actuales son p_k ($k = 1..M$). Para hacer el ajuste se cambian los parámetros $p_k \rightarrow p_k + \delta p_k$ donde:

$$\delta p_k = \text{constant} \times \beta_k \quad (2.86)$$

Esta técnica se justifica cuando nos encontramos fuera de los mínimos de la curva ya que cerca de ellos la técnica es ineficiente. Para el caso de los mínimos es mejor minimizar una función con forma parabólica, determinada por el Hessiano:

$$\alpha_{kl} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial p_k \partial p_l} \quad (2.87)$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \left\{ \frac{\partial f}{\partial p_k}(x_i, p_1..p_M) \frac{\partial f}{\partial p_l}(x_i, p_1..p_M) - [y_i - f(x_i, p_1..p_M)] \frac{\partial^2 f}{\partial p_k \partial p_l(x_i, p_1..p_M)} \right\}$$

Después de calcular el gradiente descendente y el Hessiano para el conjunto actual de parámetros, inmediatamente saltamos al mínimo cambiando los parámetros $p_k \rightarrow p_k + \delta p_k$, donde el vector desplazamiento δp_k esta determinado por el sistema lineal:

$$\sum_{i=1}^M \alpha_{kl} \delta p_l = \beta_k \quad (2.88)$$

El termino que contiene la segunda derivada de la función no es importante cerca del mínimo sin embargo puede desestabilizar el proceso de acoplamiento, así en vez de la ecuación 2.87 definimos la matriz:

$$\alpha_{kl} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \frac{\partial f}{\partial p_k}(x_i, p_1..p_m) \frac{\partial f}{\partial p_l}(x_i, p_1..p_m) \quad (2.89)$$

Devolviendo a la técnica del gradiente descendente, tenemos un problema con las unidades para ello normalizamos por α_{kk}

$$\delta p_k = \frac{\text{constante}}{\alpha_{kk}} \times \beta_k \quad (2.90)$$

Existe una manera para cambiar continuamente de una técnica a otra.

Consideremos la matriz mejorada:

$$\alpha'_{kl} = \alpha_{kl}(1 + \delta_{kl}\lambda) \quad (2.91)$$

Donde λ es una constante sin dimension, y α_{kl} con α'_{kl} en la ecuación 2.88.

$$\sum_{i=1}^M \alpha'_{kl} \delta p_l = \beta_k \quad (2.92)$$

Si tomamos $\lambda \ll 1$ el vector desplazamiento δp_k , obtenido por la ecuación 2.92 sera cercano a uno, obtenido puramente por la técnica del inverso Hessiano. Sin embargo si tomamos $\lambda \gg 1$ entonces podemos ignorar los elementos fuera de la diagonal y la solución de la ecuación 2.92 sera simplemente

$$\delta p_k = \frac{\beta_k}{\alpha'_{kk}} = \frac{\beta_k}{\alpha_{kk}(1 + \lambda)} \quad (2.93)$$

Por la forma de la ecuación significa que aumentando el parámetro λ nos acercamos al limite del “descenso mas agudo”.

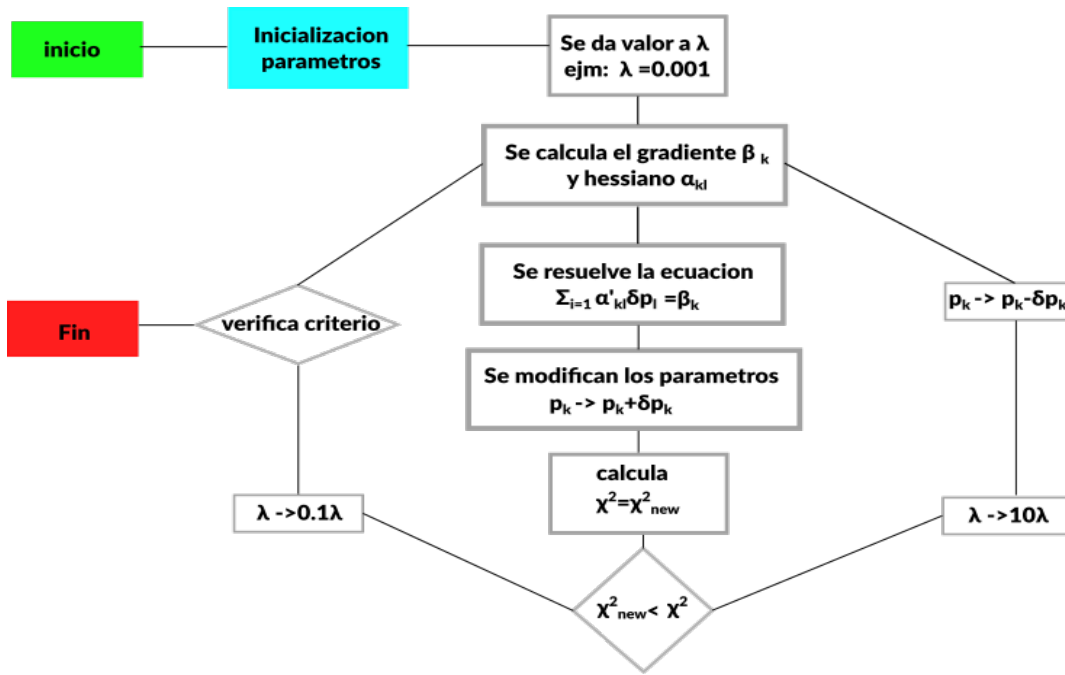


Figura 4. Diagrama de algoritmo Levenberg-Marquardt.

La minimización es un proceso iterativo. Empezamos con un valor razonable de λ . A cada iteración exitosa ($\chi_{new}^2 < \chi_{actual}^2$) se reduce en un factor de 10, moviéndose hacia el régimen del inverso Hessiano. De lo contrario ira hacia el régimen del “descenso mas agudo”, aumentando landa en un factor de 10. Cuando se cumpla con el criterio de ajuste habrá terminado .

Un asunto importante es calculo de α_{kl} y β_k . De acuerdo a la ecuación 2.85 y 2.89, primero debemos calcular la primera derivada de la función modelo $f(x, p_1, \dots, p_M)$ con respecto a los parámetros. Usaremos modelos de funciones dadas por expresiones analíticas, podemos siempre calcular las derivadas analíticamente. El criterio es necesario para detener la iteración del ciclo. La razón mas natural seria cuando el proceso de acoplamiento converja o formalmente cuando la reducción absoluta de χ_2 durante las ultimas iteraciones no exceda cierto limite de confianza $\delta\chi^2$. También debemos asegurar que el proceso de acoplamiento no tome demasiado tiempo para ello ponemos algunos limites en el numero total de iteraciones o en el tiempo total del ajuste. A pesar de la simplicidad del algoritmo Levenberg-Marquardt es notable que puede fácilmente manejar modelos que contienen un gran numero de parámetros. La velocidad de convergencia o el numero de iteraciones necesarias para al alcanzar el mínimo no son significativamente por el numero de parámetros, esto depende mas bien de lo adecuado del modelo a los datos experimentales y de la aproximación inicial[3].

Supongamos que queremos modelar un conjunto de medidas ópticas experimentales obtenidas por la técnica de reflectancia a incidencia normal $\{w_i, R_i, \delta R_i\}$ con $i = 1, \dots, N_{exp}$. Aquí w_i es la frecuencia experimental, R_i es valor experimental de la reflectancia y δR_i es el error experimental. El siguiente paso sera construir un conjunto de puntos frecuencias distinta al rango de frecuencias experimentales, la llamaremos malla de frecuencia $\{w_k^{malla}\}$ para $k = 1, \dots, N_{exp} - 2$. Donde cada punto de la malla estará entre los puntos de frecuencia experimentales w_i dados por:

$$w_k^{malla} = \frac{w_{k+1} - w_k}{2} \text{ para } k \text{ desde } 1 \text{ hasta } N - 2.$$

Asumiremos que todas las cantidades ópticas pueden ser expresadas por una parte real y una imaginaria de la función de respuesta compleja. Ahora especifiquemos como sera el funcional modelo para $R(w)$. Un buen candidato es una función modelo de forma triangular (Figura 2.1) [?]:

$$R_k^\Delta(w_k^{malla}) = \begin{cases} \frac{w_k^{malla} - w_{k-1}}{w_k - w_{k-1}} & , si & w_{k-1} < w_k^{malla} < w_k \\ \frac{w_{k+1} - w_k^{malla}}{w_{k+1} - w_k} & , si & w_k < w_k^{malla} < w_{k+1} \\ 0 & , otros & casos \end{cases} \quad (2.94)$$

El termino imaginario que corresponde al cambio de fase $\phi_k(w_k^{malla})$ puede ser obtenido analíticamente aplicando las transformaciones Kramers Kronig [?].

$$\phi_k^\Delta(w_k^{malla}) = \frac{1}{\pi} \left[\frac{g(w_k^{malla}, w_{k-1})}{w_k - w_{k-1}} - \frac{(w_{k+1} - w_{k-1})g(w_k^{malla}, w_k)}{(w_k - w_{k-1})(w_{k+1} - w_k)} + \frac{g(w_k^{malla}, w_{k+1})}{w_{k+1} - w_k} \right] \quad (2.95)$$

Donde

$$g(x, y) = (x + y) \ln |x + y| + (x + y) \ln |x - y| \quad (2.96)$$

Ahora podemos construir la función variacional en nuestro caso la reflectancia como una superposición lineal de funciones triangulares por partes R_k^Δ localizadas a frecuencias fijas w_k^{malla} (Figura 2.2)[?].

$$\hat{R}^{\Delta var}(w^{malla}) = \sum_{k=1}^{N-2} A_k \hat{R}_k^\Delta(w_k^{malla}) \quad (2.97)$$

Entonces $R(w_k^{malla})^{\Delta var}$ sera una curva a pedazos que pasa por los puntos w_k^{malla}, A_k . Donde los parámetros A_k dan forma a $R_k^\Delta(w_k^{malla})$ y de manera simultanea a $\phi_k^\Delta(w_k^{malla})$ ya que:

$$\hat{\phi}^{\Delta var}(w^{malla}) = \sum_{k=1}^{N-2} A_k \hat{\phi}_k^\Delta(w_k^{malla}) \quad (2.98)$$

Por lo que cualquier forma experimental de $R_i(w_i)$ puede ser representada por un conjunto apropiado de parámetros A_k .

Para realizar el ajuste de parámetros y encontrar la mejor aproximación entre la función variacional y los datos ópticos experimentales debemos utilizar la técnica de mínimos cuadrados y construir el funcional χ^2 [3]:

$$\chi^2(\{R_k(w_k)\}) = \sum_{k=1}^{N-2} \left(\frac{R_k^{\Delta var}(w_k^{malla}) - R_{k+1}(w)}{\delta R_{k+1}} \right)^2 \quad (2.99)$$

El modelado sera esencialmente la minimización de χ^2 . Utilizaremos una minimización estándar no lineal, en particular el algoritmo “Levenberg-Marquardt”, el cual permite un balance auto ajustable entre dos técnicas de minimización “El gradiente descendente”, y el “Inverso Hessiano” los cuales proveen de manera muy eficiente minimizar χ^2 cuando el numero de parámetros es grande. Se debe tener en cuenta que la minimización de χ^2 no debe causar un incremento fuera de cierto limite permitido, por lo que haremos uso de los llamados “limites de confianza”. De esta manera obtendremos la mejor aproximación a la función dieléctrica [3]. Algo que debemos tener en cuenta es que la función de reflectancia modelo ignora complementa mente el espectro mas allá del rango de frecuencias experimentales limitado ($w_1 < w_k^{malla} < w_N$). Por lo que deberán tomar algunas consideraciones en el futuro, si se desea modelar el la función compleja mas allá del espectro medido.

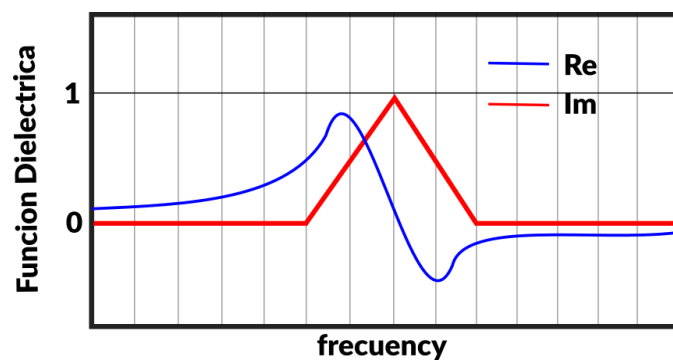


Figura 2.1: Función dieléctrica triangular.

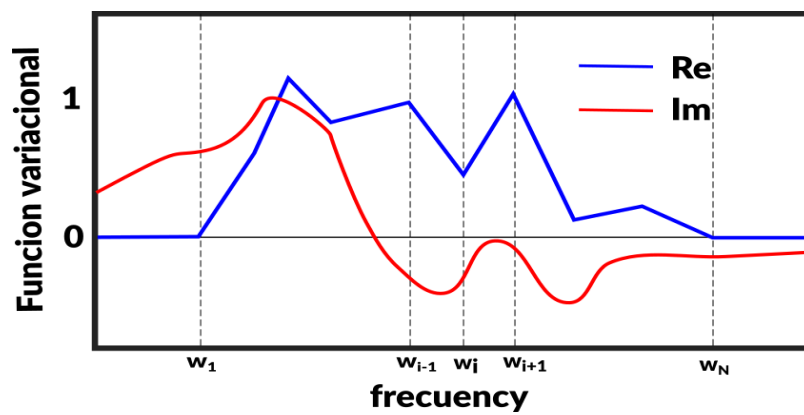


Figura 2.2: Función variacional

Entonces si el modelo de función de la reflectancia $R_k^\Delta(w_k^{malla})$ describe la mayor parte de las características del espectro entonces podemos asumir que la función da una correcta aproximación. En el caso en que debemos expandir el rango de frecuencia se debe agregar una función variacional adicional [3]:

$$R_k^{\Delta var}(w_k^{malla}) = R_k^{\Delta var}(w_k^{malla}) + R_k^{\Delta extra}(w_k^{malla}) \quad (2.100)$$

Por lo que se añade $R_k^{\Delta extra}(w)$ a $R_k^{\Delta var}(w)$, que es la contribución dominante a la reflectancia .

2.7. Límites de confianza

Cuando el acoplamiento esta completo, a menudo es necesario estimar las barras de error de los parámetros p_k obtenidos, desde el punto de vista estadístico es mejor hablar de los llamados limites de confianza. Uno puede intuir el limite de confianza de un parámetro p_k como pumo el valor mas grande posible de δp_k , tal que cuando el valor $p_k \rightarrow p_k^{(0)} + \delta p_k$ cambie no cause un incremento irreal del termino chi-cuadrado. Es esencial agregar a esta definición que después de cambiar el valor de p_k , se debe minimizar χ^2 con respecto a los parámetros restantes. La importancia de una minimización extra es clara desde el siguiente ejemplo [3].

Consideremos la función modelo f , la cual depende de dos parámetro(p_1 y p_2), incluso vemos que no depende de x esto es $f(p_1, p_2) = p_1 + p_2$ suponga que nuestro conjuntos de puntos contiene $\{y = 1, \sigma = 1\}$, el termino chi-cuadrado sera $\chi^2 = (1 - p_1 - p_2)^2$. El procedimiento de ajuste puede converger por ejemplo a $p_1^{(0)} = 0,6$ y $p_2^{(0)} = 0,4$ (en este caso el ajuste es exacto $\chi^2 = 0$). Obviamente estos parámetros no tienen limites ya que para cualquier numero a , la combinación $p_1 = a, p_2 = 1 - a$. también provee un acoplamiento exacto. Sin embargo a un valor fijo de p_2 el cambio de p_1 causara un incremento de chi-cuadrado, Si nosotros ahora colocamos un valor realista a χ^2 como 0.01 entonces formalmente el limite de confianza de p_1 debe ser 0.1. lo mismo es valido para p_2 , se puede decir que los parámetros p_1 y p_2 están correlacionados. El calculo de los limites de confianza δp_k es relativamente sencillo. Podemos ignorar las desviaciones de $\chi^2(p_1, \dots, p_M)$ cerca del punto mínimo $\chi_{(0)}^2(p_1^{(0)}, \dots, p_M^{(0)})$ de la forma cuadrática, dado por la matriz Hessiana α_{kl} [3].

$$\chi^2 - \chi_{(0)}^2 = \sum_{k,l} \alpha_{kl} (p_k - p_k^{(0)}) (p_l - p_l^{(0)}) \quad (2.101)$$

Sea $\delta\chi^2$ la diferencia $\chi^2 - \chi_{(0)}^2$ máxima aceptable. Entonces se obtiene:

$$\delta p_k = \sqrt{(\delta\chi^2)(\alpha^{-1})^{kk}} \quad (2.102)$$

donde $(\alpha^{-1})^{kl}$ es la inversa de la matriz Hessiana también llamada "matriz de covariancia". Note que todos los elementos de la diagonal $(\alpha^{-1})^{kk}$ son positivos porque $\chi_{(0)}^2 = (p_1^0, \dots, p_m^0)$ es un punto mínimo local y la ecuación (25) puede ser siempre aplicada. Afortunadamente de la ecuación (25) se sigue que $\delta\chi^2$ escala los limites de confianza de todos los parámetros proporcionalmente. Por consiguiente se puede comparar de forma fiable las barras de error de diferentes parámetros a pesar de que sus valores puedan estar mal definidos [3].

Capítulo 3

CAPITULO 3: METODOLOGIA

Este capítulo presenta los resultados de la investigación que validan la efectividad de los métodos empleados. Estos resultados pueden presentarse en forma de gráficas, imágenes, tablas, etc. En la discusión se analizan los aspectos que pudieron influenciar los resultados obtenidos: fuentes de error, limitantes y restricciones, entre otros; y se comparan los resultados de los métodos empleados con los de otras investigaciones previas.

3.1. Diseño de la Aplicacion Web

Aquí además de una breve justificación acerca de por qué el trabajo es importante a nivel académico, social, etc, también describe los objetivos específicos y el objetivo general de manera resumida y en párrafo, procura no usar viñetas ni nada por el estilo, sólo redacción.

3.2. Implementación y Desarrollo

Aquí además de una breve justificación acerca de por qué el trabajo es importante a nivel académico, social, etc, también describe los objetivos específicos y el objetivo general de manera resumida y en párrafo, procura no usar viñetas ni nada por el estilo, sólo redacción.

La inclusión adecuada de figuras, tablas y ecuaciones en documentos LaTeX es fundamental para enriquecer y comunicar de manera efectiva la información presentada. Estos elementos gráficos permiten visualizar datos complejos, ilustrar conceptos clave y mejorar la comprensión general del contenido. Por ejemplo se haría algo como:


3.3. Integracion de Asistentes GTPs para el analisis de resultados

Aquí además de una breve justificación acerca de por qué el trabajo es importante a nivel académico, social, etc, también describe los objetivos específicos y el objetivo general de manera resumida y en párrafo, procura no usar viñetas ni nada por el estilo, sólo redacción.

Y las puedes citar siempre usando [3.1](#).

En primer lugar, las figuras juegan un papel crucial en la presentación de resultados, gráficos y diagramas. LaTeX permite incorporar imágenes en varios formatos, como PNG, JPEG o PDF. Al utilizar el entorno "figure", es posible agregar títulos, etiquetas y referencias cruzadas a las figuras para hacer referencia a ellas en el texto. La posibilidad de ajustar el tamaño, ubicación y alineación de las figuras permite una presentación visualmente atractiva y coherente.

Las tablas también son elementos esenciales en la presentación de datos tabulados. Con LaTeX, es posible crear tablas personalizadas utilizando el entorno "tabular". Se pueden definir diferentes formatos de celdas, alinear el contenido y agregar líneas horizontales y verticales para mejorar la legibilidad. Además,



figures/compute-trends.png

Figura 3.1: Compute trends are slower than previously reported

LaTeX permite etiquetar y referenciar tablas, lo que facilita la incorporación de análisis y discusiones específicas en el texto.

Mi recomendación es usar esta herramienta: <https://www.tablesgenerator.com/>. Se pueden subir las talas desde un excel, o llenarlas en línea y luego obtener el código para ponerlas aquí, es más sencillo, en latex escribir tablas puede ser un poco engorroso. Este es un ejemplo:

Otro aspecto importante son las ecuaciones matemáticas, especialmente en documentos académicos y científicos. LaTeX es conocido por su capacidad para producir ecuaciones de alta calidad y con una presentación profesional. Utilizando el modo matemático, se pueden crear ecuaciones simples o complejas mediante comandos y símbolos intuitivos. La numeración automática de ecuaciones permite hacer referencia a ellas fácilmente en el texto, garantizando una coherencia y claridad en la exposición de la información.

$$E = Mc^2 + \sqrt{\frac{1-\gamma}{\gamma_0}} m_C v^2, \quad (3.1)$$

LaTeX ofrece numerosas herramientas y paquetes que simplifican la inserción y gestión de figuras, tablas y ecuaciones. Por ejemplo, el paquete "graphicx" permite una manipulación flexible de imágenes, mientras que "booktabs" proporciona un formato de tabla profesional con líneas horizontales mejoradas.

Cuadro 3.1: Compute trends are slower than previously reported

Col1	Col2	Col2	Col3
1	6	87837	787
2	7	78	5415
3	545	778	7507
4	545	18744	7560
5	88	788	6344

Además, para ecuaciones más avanzadas, el paquete `.amsmath.` ofrece una amplia gama de comandos matemáticos adicionales.

En conclusión, el uso adecuado de figuras, tablas y ecuaciones en documentos LaTeX mejora significativamente la presentación y comprensión del contenido. La capacidad para referenciar y organizar estos elementos gráficos brinda coherencia y facilita la lectura del documento. Con las herramientas y paquetes disponibles, LaTeX se convierte en una opción poderosa y versátil para aquellos que buscan producir documentos académicos, informes técnicos o trabajos científicos de alta calidad.

Capítulo 4

CAPITULO 4: RESULTADOS y DISCUSIONES

4.1. Comparación con Métodos y Herramientas Existentes

La introducción presenta el problema que aborda la investigación en su contexto de aplicación, y la solución propuesta en el trabajo. Incluye referencias de los trabajos previos realizados en la misma temática (estado del arte), y debe resaltar la diferencia entre esos trabajos y la metodología propuesta. Es importante que queden claros los aspectos innovadores, aportes y mejoras logradas con la metodología propuesta. Para mayor información sobre cómo redactar el documento de tesis, consultar Katz [?].

4.2. Interpretación y Conclusiones de los Resultados Obtenidos

Aquí además de una breve justificación acerca de por qué el trabajo es importante a nivel académico, social, etc, también describe los objetivos específicos y el objetivo general de manera resumida y en párrafo, procura no usar viñetas ni nada por el estilo, sólo redacción.

4.3. Limitaciones de la Aplicación y Posibles Mejoras

Aquí además de una breve justificación acerca de por qué el trabajo es importante a nivel académico, social, etc, también describe los objetivos específicos y el objetivo general de manera resumida y en párrafo, procura no usar viñetas ni nada por el estilo, sólo redacción. Futuras

Capítulo 5

CAPITULO 5: CONCLUSIONES

5.1. Resumen de los Hallazgos

Aquí además de una breve justificación acerca de por qué el trabajo es importante a nivel académico, social, etc, también describe los objetivos específicos y el objetivo general de manera resumida y en párrafo, procura no usar viñetas ni nada por el estilo, sólo redacción.

5.2. Contribuciones de la Tesis al Campo de la Óptica Física y la Programación

Aquí además de una breve justificación acerca de por qué el trabajo es importante a nivel académico, social, etc, también describe los objetivos específicos y el objetivo general de manera resumida y en párrafo, procura no usar viñetas ni nada por el estilo, sólo redacción. Presentan el análisis de cómo el trabajo desarrollado aporta a la solución del problema. Se destacan los principales resultados del trabajo de investigación, y se dan ideas para desarrollar en trabajos futuros. Se sugiere redactar una conclusión por cada objetivo específico del proyecto.

Bibliografía

- [1] A. B. Kuzmenko. A universal method of extraction of the complex dielectric function. *Physical Review B*, 72(7):075108, 2005.
- [2] Rohit P. Prasankumar and Antoinette J. Taylor. *Optical techniques for Solid-State Materials characterization*. CRC PRes, 2012.
- [3] A. Kuzmenko. Guide to reffit, software to fit optical spectra. University of Geneva, Switzerland: Reffit, 2005.
- [4] Martin Dressel and George Grüner. *Electrodynamics of Solids: Optical Properties of Electrons in Matter*. Cambridge University Press, 2003.
- [5] I. Sommerville. *Ingenieria del Software*. Pearson Addison Wesley, Departamento Ciencia de la Computacion e Inteligencia Artificial, Universidad de Alicante, 2005.
- [6] Martin Dressel and George Gruner. *Electrodynamics of Solids*. Cambridge University Press, 2003.
- [7] Mark Fox. *Optical Properties of Solids*. Oxford, 2001.