



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CÁLCULO NUMÉRICO DE PROPIEDADES ÓPTICAS
DE ERITROCITOS SANOS Y ENFERMOS

T E S I S
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
FÍSICA BIOMÉDICA

PRESENTA:

Dana Larissa Luna González

DIRECTOR DE TESIS:

Director

Place, 2025



1. Datos del alumno

Luna
González
Dana Larissa
776 101 4262
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física Biomédica
421122680

2. Datos del tutor

Dr
Secretary (thesis director)
Last name
Last name

3. Datos del sinodal 1

Dr
President
Last name
Last name

4. Datos del sinodal 2

Dr
Vocal
Last name
Last name

5. Datos del sinodal 3

Dr
substitute 1
Last name
Last name

6. Datos del sinodal 4

Dr
Substitute 2
Last name
Last name

7. Datos del trabajo escrito

Cálculo numérico de propiedades ópticas de eritrocitos sanos y enfermos
pages
2025

Agradecimientos

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Declaración de autenticidad

Por la presente declaro que, salvo cuando se haga referencia específica al trabajo de otras personas, el contenido de esta tesis es original y no se ha presentado total o parcialmente para su consideración para cualquier otro título o grado en esta o cualquier otra Universidad. Esta tesis es resultado de mi propio trabajo y no incluye nada que sea el resultado de algún trabajo realizado en colaboración, salvo que se indique específicamente en el texto.

Dana Larissa Luna González. Place, 2025

„Wo es viel Licht ist, ist auch viel Schatten.“
“Donde hay mucha luz, la sombra es profunda.”

Götz von Berlichingen, primer acto.

J. W. von Goethe

Resumen/Abstract

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Índice general

Agradecimientos	iii
Resumen	ix
Introducción	1
1. Esparcimiento de luz por partículas	3
1.1. Formalismo	3
1.2. Secciones transversales	6
1.3. Relaciones de Kramers-Kronig	10
1.4. Relaciones Kramers-Kronig sustractivas	14
2. Eritrocitos y sus patologías	17
2.1. Morfología y alteraciones	17
2.2. Modelado y propiedades ópticas	20
3. Técnica de integración finita	27
3.1. Celda dual	27
3.2. Maxwell Grid Equations	28
3.3. Convergencia	29
Resultados	31
Conclusiones	33
A. Ajuste con el modelo de Lorentz	35
B. Reconstrucción con SSKK	39

Introducción

It is recommended to fill in this part of the document with the following information:

- Your field: Context about the field your are working
- Motivation: Backgroung about your thesis work and why did you choose this project and why is it important.
- Objectives: What question are you answering with your work.
- Methodology: What are your secondary goals so you achieve your objective. Also, how are you answering yout question: which method or model.
- Structure: How is this thesis divides and what is the content of each chapter.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper,

ÍNDICE GENERAL

felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Capítulo 1

Esparcimiento de luz por partículas

En este capítulo se estudia la interacción electromagnética entre la luz y la materia mediante una formulación basada en la función dieléctrica dependiente de la frecuencia de la luz considerada. En la primera parte se presentan las ecuaciones de Maxwell y las relaciones constitutivas para sistemas lineales, homogéneos e isótropos y se analiza la solución de ondas planas, la cual se emplea para describir el flujo de energía transportado por una onda electromagnética mediante el vector de Poynting y su promedio temporal. En la segunda parte se derivan las secciones transversales de absorción, esparcimiento y extinción, que permiten cuantificar la interacción entre una onda incidente y una partícula [1]. Adicionalmente, en la Sección 1.3 se estudian las relaciones de Kramers–Kronig aplicadas a la función dieléctrica. Estas relaciones permiten vincular las partes real e imaginaria de cualquier función óptica lineal compleja, condicionada a pruebas de causalidad y analiticidad en el contexto de funciones complejas [2]. Finalmente, se discuten las limitaciones de aplicar las relaciones de Kramers–Kronig a datos experimentales con un rango finito de frecuencias y se presenta la derivación de las relaciones de Kramers–Kronig sustractivas.

1.1. Formalismo

Las ecuaciones de Maxwell, junto con la fuerza de Lorentz¹, describen a la electrodinámica clásica, que se centra en el origen y comportamiento de los campos electromagnéticos [3]. En unidades del Sistema Internacional (SI), las ecuaciones de Maxwell se expresan en forma diferencial como [4]

¹La fuerza de Lorentz es la fuerza que experimenta una partícula de carga q que se desplaza con velocidad \mathbf{v} en presencia de un campo eléctrico \mathbf{E} y un campo magnético \mathbf{B} . En unidades del SI está dada por $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ [3].

1. ESPARCIMIENTO DE LUZ POR PARTÍCULAS

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_{\text{tot}}}{\epsilon_0}, \quad (\text{Ley de Gauss eléctrica}) \quad (1.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (\text{Ley de Gauss magnética}) \quad (1.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (\text{Ley de Faraday-Lenz}) \quad (1.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}_{\text{tot}} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (\text{Ley de Ampère-Maxwell}) \quad (1.1d)$$

donde se obvian las dependencias espaciales y temporales y $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ es el campo eléctrico, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ es el campo magnético; ρ_{tot} es la densidad volumétrica de carga total, \mathbf{J}_{tot} la densidad volumétrica de corriente total; ϵ_0 es la permitividad eléctrica en el vacío y μ_0 la permeabilidad magnética en el vacío.

Las ecuaciones de Maxwell se pueden reescribir en términos del vector de desplazamiento eléctrico \mathbf{D} y el campo \mathbf{H} , dados por [4]

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \quad \text{y} \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\mu_0} - \mathbf{M}(\mathbf{r}, t), \quad (1.2)$$

donde \mathbf{P} es la polarización y \mathbf{M} es la magnetización de un material determinado, que corresponden al momento dipolar eléctrico y magnético por unidad de volumen, respectivamente, inducidos en el material. La relación lineal más general entre \mathbf{E} y \mathbf{D} está dada por [5]

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{V'} \overset{\leftrightarrow}{\epsilon}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}', t') dV' dt' \quad (1.3)$$

donde $\overset{\leftrightarrow}{\epsilon}$ es un tensor de rango dos y representa una función de respuesta² del material en el espacio y el tiempo [5] y V' es el volumen donde se encuentra el material. La Ec. (1.3) muestra que el campo de desplazamiento eléctrico al tiempo t depende del campo eléctrico en todos los demás tiempos t' . Adicionalmente, el campo de desplazamiento eléctrico en un punto \mathbf{r} depende de los valores del campo eléctrico en puntos vecinos \mathbf{r}' [5]. A estas características, se les conoce como la no localidad temporal y espacial, respectivamente, entre \mathbf{D} y \mathbf{E} [5].

En un medio isótropo y homogéneo, $\overset{\leftrightarrow}{\epsilon} = \epsilon \text{ diag}(1, 1, 1)$ donde ϵ es una función escalar [5] y $\text{diag}(1, 1, 1)$ es la matriz identidad; en este caso, tanto ϵ como \mathbf{E} son independientes de la posición y dependen únicamente de la diferencia temporal, es decir [5]

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(t - t') \mathbf{E}(t') dt', \quad (1.4)$$

de modo que la Ec. (1.4) es una convolución³ en el tiempo. Al aplicar la transformada de Fourier y el teorema de la convolución⁴, la Ec. (1.4) se reescribe como un producto en el espacio de

²Las funciones de respuesta proporcionan información sobre el efecto de las interacciones electromagnéticas con el medio y sobre la estructura y propiedades del propio medio [6].

³La convolución de dos funciones $f(t), g(t)$ está dada por $f * g = \int_{-\infty}^{\infty} f(t - t')g(t') dt'$ [7].

⁴El teorema de la convolución es $\mathcal{F}[f * g] = \mathcal{F}[f]\mathcal{F}[g]$, donde \mathcal{F} es la transformada de Fourier de una función.

1.1 Formalismo

frecuencias. Realizando el mismo procedimiento con las relaciones constitutivas que involucran a los campos magnéticos \mathbf{B} y \mathbf{H} , se llega a un resultado análogo. Esto es [1]

$$\mathbf{D}(\omega) = \varepsilon(\omega)\mathbf{E}(\omega) \quad \text{y} \quad \mathbf{B}(\omega) = \mu(\omega)\mathbf{H}(\omega). \quad (1.5)$$

Así, en el espacio de frecuencias, la respuesta del medio queda completamente caracterizada por una función dieléctrica y una permeabilidad magnética dependiente de la frecuencia. Adicionalmente, la relación lineal entre \mathbf{D} y \mathbf{E} se debe a que tanto \mathbf{P} como \mathbf{M} tienen a su vez esta relación con los campos \mathbf{E} y \mathbf{H} , respectivamente. Entonces, en un medio lineal, homogéneo e isótropo, \mathbf{P} es paralelo a \mathbf{E} y \mathbf{M} es paralelo a \mathbf{H} , con coeficientes de proporcionalidad $\varepsilon_0\chi(\omega)$ y $\chi_m(\omega)$, respectivamente, es decir [4]

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0\chi(\omega)\mathbf{E} \quad \text{y} \quad \mathbf{M} = \chi_m(\omega)\mathbf{H}, \quad (1.6)$$

donde χ y χ_m son cantidades adimensionales que corresponden a la susceptibilidad eléctrica y magnética, respectivamente. Al sustituir las Ecs. (1.6) en las Ecs. (1.2) y al comparar con las Ecs. (1.5) se obtiene que

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0[1 + \chi(\omega)] \quad \text{y} \quad \mu(\omega) = \mu_0[1 + \chi_m(\omega)]. \quad (1.7)$$

En ausencia de fuentes externas ($\rho_{\text{tot}} = 0, \mathbf{J}_{\text{tot}} = \mathbf{0}$) y en un medio lineal, homogéneo e isótropo, las Ecs. (1.1) pueden desacoplarse y, al aplicar la transformada de Fourier temporal, se obtienen las ecuaciones de Helmholtz para \mathbf{E} y para \mathbf{B} [5]

$$\nabla^2\mathbf{E} + k^2\mathbf{E} = 0 \quad \text{y} \quad \nabla^2\mathbf{B} + k^2\mathbf{B} = 0, \quad (1.8)$$

con k una constante denominada número de onda. Una solución a la ecuación de Helmholtz son las ondas planas, en las que los campos están descritos por superficies de fase constante [4]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad \text{y} \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (1.9)$$

donde \mathbf{E}_0 y \mathbf{B}_0 corresponden a las amplitudes de los campos, ω es la frecuencia angular de la onda y \mathbf{k} el vector de onda. Para que las Ecs. (1.9) satisfagan las Ecs. (1.8), se impone la relación de dispersión de una onda plana dada por $k = \sqrt{\mu\varepsilon}\omega$, donde ε y μ corresponden a la permitividad eléctrica y la permeabilidad magnética del medio [5]. La relación de dispersión se puede reescribir en términos del índice de refracción del material dado por [5]

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon(\omega)\mu(\omega)}{\varepsilon_0\mu_0}}, \quad (1.10)$$

En este trabajo se considera la convención de la transformada de Fourier como [7]

$$f(\omega) = \mathcal{F}[f(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{i\omega t} dt, \quad \text{y} \quad f(t) = \mathcal{F}^{-1}[f(\omega)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega)e^{i\omega t} d\omega,$$

donde la dependencia indica si se trata de la transformada de Fourier directa (dependencia en la frecuencia) o inversa (dependencia en el tiempo).

1. ESPARCIMIENTO DE LUZ POR PARTÍCULAS

con lo que se obtiene

$$k(\omega) = \frac{\omega n(\omega)}{c}, \quad (1.11)$$

donde $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ es la velocidad de la luz en el vacío.

El flujo de energía que transporta una onda electromagnética en la dirección de propagación se describe mediante el vector de Poynting \mathbf{S} [4]

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}). \quad (1.12)$$

El vector de Poynting tiene unidades de energía por unidad de área y por unidad de tiempo. Para una onda armónica⁵, \mathbf{E} y \mathbf{B} oscilan en el tiempo, de modo que \mathbf{S} también varía en el tiempo, por lo que se emplea el vector de Poynting promedio [1]

$$\langle \mathbf{S} \rangle_t = (1/2) \text{Re}\{\mathbf{E} \times (\mathbf{B}^*/\mu_0)\}, \quad (1.13)$$

donde $\langle \mathbf{S} \rangle_t$ denota el promedio temporal, $\text{Re}\{\cdot\}$ la parte real de un número complejo y $*$ la operación complejo conjugado.

1.2. Secciones transversales

La interacción luz–materia puede describirse clásicamente mediante dos procesos fundamentales: la absorción y el esparcimiento, cuyo efecto conjunto se denomina extinción [1]. Experimentalmente, estos fenómenos se evidencian al comparar la potencia medida por un detector con y sin la presencia de una partícula iluminada por un campo electromagnético incidente ($\mathbf{E}_{\text{inc}}, \mathbf{H}_{\text{inc}}$) la cual genera un campo electromagnético esparcido ($\mathbf{E}_{\text{sca}}, \mathbf{H}_{\text{sca}}$) como se ejemplifica en la Fig. 1.1, donde se muestra una partícula de geometría arbitraria iluminada por un campo ($\mathbf{E}_{\text{inc}}, \mathbf{H}_{\text{inc}}$) representado por vectores en rojo paralelos. La interacción del campo con la partícula genera un campo electromagnético esparcido ($\mathbf{E}_{\text{sca}}, \mathbf{H}_{\text{sca}}$) representado por los vectores en rojo que surgen de la partícula y se propagan en distintas direcciones. Este campo puede ser medido con un detector [1].

Para cuantificar la extinción, absorción y el esparcimiento de manera macroscópica, en esta sección se introducen las secciones transversales de extinción, absorción y esparcimiento, al considerar a la partícula embebida en un medio no absorbente e iluminada por una onda plana [1]. Bajo estas condiciones, la energía transportada por los campos electromagnéticos que es absorbida por la partícula W_{abs} , se calcula al integrar el promedio temporal del vector de Poynting $\langle \mathbf{S} \rangle_t$ [Ec. (1.13)] sobre una superficie cerrada A . Para simplificar el análisis, dicha superficie se toma como una esfera de radio r que encierra completamente a la partícula, como se muestra en la Fig. 1.2, es decir,

⁵Es decir, ondas electromagnéticas $u(\mathbf{r}, t)$ cuya dependencia temporal se describe como $u(\mathbf{r}, t) = \hat{u}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ [3].

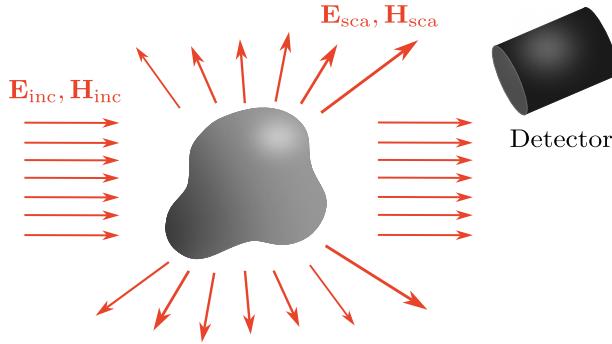


Fig. 1.1: Diagrama del problema de esparcimiento. El campo electromagnético ($E_{\text{inc}}, H_{\text{inc}}$) incide sobre una partícula arbitraria, produciendo el campo electromagnético esparcido ($E_{\text{sca}}, H_{\text{sca}}$).

$$W_{\text{abs}} = - \int_A \langle \mathbf{S} \rangle_t \cdot \hat{\mathbf{e}}_r \, dA, \quad (1.14)$$

donde $\langle \mathbf{S} \rangle_t$ y $\hat{\mathbf{e}}_r$ son paralelos y el signo negativo garantiza que W_{abs} sea una cantidad positiva definida, asumiendo que únicamente hay procesos de absorción y no de emisión [1]. Es posible descomponer el vector de Poynting total en tres contribuciones [1]

$$\langle \mathbf{S}_{\text{inc}} \rangle_t = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\{\mathbf{E}_{\text{inc}} \times \mathbf{H}_{\text{inc}}^*\}, \quad (1.15a)$$

$$\langle \mathbf{S}_{\text{sca}} \rangle_t = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\{\mathbf{E}_{\text{sca}} \times \mathbf{H}_{\text{sca}}^*\}, \quad (1.15b)$$

$$\langle \mathbf{S}_{\text{ext}} \rangle_t = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\{\mathbf{E}_{\text{inc}} \times \mathbf{H}_{\text{sca}}^* + \mathbf{E}_{\text{sca}} \times \mathbf{H}_{\text{inc}}^*\}, \quad (1.15c)$$

donde los subíndices “inc”, “sca” y “ext” se refieren al campo incidente, al campo esparcido y a la interacción entre los dos anteriores, respectivamente. Al integrar estas contribuciones sobre A se obtiene que $W_{\text{abs}} = W_{\text{inc}} - W_{\text{sca}} + W_{\text{ext}}$, donde [1]

$$W_{\text{inc}} = - \int_A \langle \mathbf{S}_{\text{inc}} \rangle_t \cdot \hat{\mathbf{e}}_r \, dA, \quad (1.16a)$$

$$W_{\text{sca}} = \int_A \langle \mathbf{S}_{\text{sca}} \rangle_t \cdot \hat{\mathbf{e}}_r \, dA, \quad (1.16b)$$

$$W_{\text{ext}} = - \int_A \langle \mathbf{S}_{\text{ext}} \rangle_t \cdot \hat{\mathbf{e}}_r \, dA. \quad (1.16c)$$

Los signos de las Ecs. (1.16) se eligen de forma que sean cantidades positivas considerando las direcciones de los vectores de Poynting y de $\hat{\mathbf{e}}_r$. Como la energía del campo incidente que cruza la esfera es la misma que la que entra, W_{inc} se anula, entonces

$$W_{\text{ext}} = W_{\text{abs}} + W_{\text{sca}}. \quad (1.17)$$

Al asumir que la contribución dominante del campo esparcido es la dipolar, una partícula iluminada por una onda plana $\mathbf{E}_{\text{inc}} = E_0 \hat{\mathbf{e}}_x$, con $\mathbf{H}_{\text{inc}} = (k/\mu\omega) \hat{\mathbf{e}}_z \times \mathbf{E}_{\text{inc}}$, puede describirse

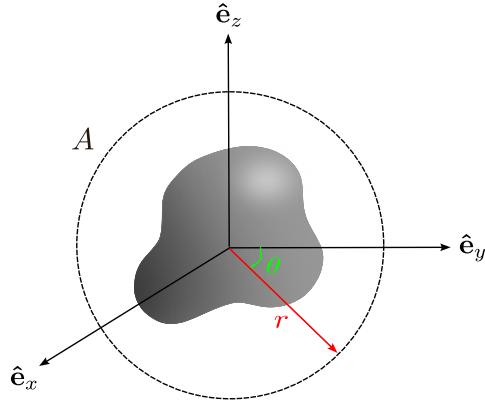


Fig. 1.2: Esquema de la superficie de integración A como una esfera de radio r centrada en el origen y que encierra a una partícula.

mediante un momento dipolar inducido \mathbf{p} caracterizado por una polarizabilidad α . Por lo tanto, el campo esparcido se describe como una onda esférica de frecuencia angular ω dada por [1]

$$\mathbf{E}_{\text{sca}} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \mathbf{X} E_0 \quad \text{y} \quad \mathbf{H}_{\text{sca}} = \frac{k}{\omega\mu} \hat{\mathbf{e}}_r \times \mathbf{E}_{\text{sca}}, \quad (1.18)$$

donde \mathbf{X} es el vector de amplitud de esparcimiento

$$\mathbf{X} = \frac{ik^3}{4\pi} \alpha [\hat{\mathbf{e}}_r \times (\hat{\mathbf{e}}_r \times \hat{\mathbf{e}}_x)]. \quad (1.19)$$

A partir de las Ecs. (1.18) y de las ecuaciones del campo electromagnético incidente (\mathbf{E}_{inc} , \mathbf{H}_{inc}), es posible determinar W_{ext} , que se obtiene a partir de $\langle \mathbf{S}_{\text{ext}} \rangle_t$, definido en la Ec. (1.15c). Para ello se considera⁶

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{inc}} \times \mathbf{H}_{\text{sca}}^* &= E_0 \hat{\mathbf{e}}_x \times \left(\frac{k}{\omega\mu} \hat{\mathbf{e}}_r \times \mathbf{E}_{\text{sca}} \right)^* \\ &= \frac{k|E_0|^2}{\omega\mu} \frac{e^{-ik(r-z)}}{ikr} [\hat{\mathbf{e}}_r (\hat{\mathbf{e}}_x \cdot \mathbf{X}^*) - \mathbf{X}^* (\hat{\mathbf{e}}_x \cdot \hat{\mathbf{e}}_r)], \end{aligned}$$

y análogamente,

$$\mathbf{E}_{\text{sca}} \times \mathbf{H}_{\text{inc}}^* = \frac{k|E_0|^2}{\omega\mu} \frac{1}{-ikr} [\hat{\mathbf{e}}_z (\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_x) - \hat{\mathbf{e}}_x (\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z)].$$

De esta forma,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}_{\text{ext}} \rangle_t &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ \frac{k|E_0|^2}{\omega\mu} \frac{e^{-ik(r-z)}}{ikr} [\hat{\mathbf{e}}_r (\hat{\mathbf{e}}_x \cdot \mathbf{X}^*) - \mathbf{X}^* (\hat{\mathbf{e}}_x \cdot \hat{\mathbf{e}}_r)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{k|E_0|^2}{\omega\mu} \frac{1}{-ikr} [\hat{\mathbf{e}}_z (\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_x) - \hat{\mathbf{e}}_x (\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z)] \right\}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Sustituyendo la Ec. (1.20) en la Ec. (1.16c) y empleando las relaciones $\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r = 0$, $\hat{\mathbf{e}}_r \cdot \hat{\mathbf{e}}_z = \cos\theta$

⁶En donde de empleó la identidad del triple producto vectorial dada por $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$ [4].

y $\hat{\mathbf{e}}_r \cdot \hat{\mathbf{e}}_x = \cos \varphi \sin \theta$, se obtiene

$$\begin{aligned} W_{\text{ext}} = - \int_A \langle \mathbf{S}_{\text{ext}} \rangle_t \cdot \hat{\mathbf{e}}_r \, dA &= \frac{|E_0|^2 k}{\omega \mu} \operatorname{Re} \left\{ \frac{e^{-ikr}}{ikr} \int_A e^{ikz} (\hat{\mathbf{e}}_x \cdot \mathbf{X}^*) \, da + \right. \\ &\quad + \frac{e^{-ikr}}{ikr} \int_A e^{-ikz} (\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_x) \cos \theta \, da + \\ &\quad \left. - \frac{e^{-ikr}}{ikr} \int_A e^{-ikz} (\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z) \sin \theta \cos \varphi \, da \right\}, \end{aligned} \quad (1.21)$$

que al integrar por partes⁷, simplificando se tiene que [1]

$$W_{\text{ext}} = I_{\text{inc}} \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{Re}\{(\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_x)_{\theta=0}\},$$

con I_{inc} la irradiancia de la onda incidente, que corresponde a $|\langle \mathbf{S}_{\text{inc}} \rangle_t| = k|E_0|^2/(\omega \mu)$, y por consiguiente⁸,

$$C_{\text{ext}} = \frac{W_{\text{ext}}}{I_{\text{inc}}} = \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{Re}\{(\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{e}}_x)_{\theta=0}\}, \quad (1.22)$$

que es la sección transversal de extinción y que posee dimensiones de área. Al sustituir las Ecs. (1.18) en la Ec. (1.16b) se obtiene

$$C_{\text{sca}} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{|\mathbf{X}|^2}{k^2} \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \quad (1.23)$$

Finalmente, la Ec. (1.17) puede ser reescrita como [1]

$$C_{\text{ext}} = C_{\text{abs}} + C_{\text{sca}}, \quad (1.24)$$

donde $C_{\text{abs}} = W_{\text{abs}}/I_{\text{inc}}$ y $C_{\text{sca}} = W_{\text{sca}}/I_{\text{inc}}$ corresponden a las secciones transversales de absorción y esparcimiento, respectivamente. Las Ecs. (1.22)–(1.24) son propiedades macroscópicas y medibles que proveen información sobre la energía absorbida y esparcida por una partícula [1]. Existen diversos métodos experimentales para determinar la sección transversal de extinción, entre ellos

⁷La Ec. (1.21) presenta integrales del tipo

$$\int_{-1}^1 e^{ikr\mu} f(\mu) \, d\mu,$$

con $\mu = \cos \theta$, que al integrar por partes dos veces resulta en [1]

$$\int_{-1}^1 e^{ikr\mu} f(\mu) \, d\mu = f(\mu) \frac{e^{ikr\mu}}{ikr} \Big|_{-1}^1 + \frac{1}{(kr)^2} \left[\frac{df}{d\mu} e^{ikr\mu} \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{d^2 f}{dx^2} \right],$$

y como $kr \ll 1$, entonces [1]

$$\int_{-1}^1 e^{ikr\mu} f(\mu) \, d\mu \approx \frac{1}{ikr} [f(1)e^{ikr} - f(-1)e^{-ikr}].$$

⁸Debido al teorema óptico, la extinción sólo depende de la amplitud de esparcimiento en la dirección de propagación y es el efecto combinado de la absorción en la partícula y el esparcimiento por la partícula en todas las direcciones [1].

1. ESPARCIMIENTO DE LUZ POR PARTÍCULAS

la espectroscopía basada en la ley de Beer–Lambert [1] y la microscopía holográfica digital [8]. Ambos se fundamentan en medir la superposición entre la onda incidente y la esparcida por la partícula en la dirección de propagación.

1.3. Relaciones de Kramers-Kronig

El estudio del esparcimiento y la absorción de partículas mediante secciones transversales proporciona una descripción macroscópica de su respuesta óptica. Este enfoque se complementa con una caracterización microscópica del material, representada por su función dieléctrica $\varepsilon(\omega)$ [2]. En el espacio de frecuencias, la función dieléctrica de un material es, en general, una función compleja: su parte real $\varepsilon'(\omega)$ representa la capacidad del material para almacenar energía mediante la polarización eléctrica, mientras que su parte imaginaria $\varepsilon''(\omega)$ describe la disipación o pérdida de energía debida a procesos de absorción [9]. Desde un punto de vista físico, $\varepsilon''(\omega)$ se origina en el desfase entre el campo eléctrico incidente y la respuesta inducida de los dipolos del material [10]. Experimentalmente, a menudo solo se puede realizar la medición directa de una de las dos contribuciones de $\varepsilon(\omega)$. Por ejemplo, técnicas como la espectroscopía de absorción o de transmisión permiten obtener información disipativa, es decir, de ε'' [2]. Esta limitación motiva el desarrollo de las relaciones de Kramers-Kronig (KK), las cuales establecen una conexión entre las partes real e imaginaria de cualquier función óptica lineal compleja [2]. La base de las relaciones KK reside en el principio de causalidad [2]: la respuesta del sistema no puede preceder temporalmente a la excitación que la genera. En el contexto del esparcimiento de ondas electromagnéticas, esto implica que el campo esparcido no puede existir antes de que la onda incidente alcance el centro de esparcimiento [2]. Este principio, junto con la condición de analiticidad⁹ de la función óptica en el semiplano superior del plano complejo de frecuencias, garantiza que las partes real e imaginaria de funciones como la susceptibilidad eléctrica, la función dieléctrica, el índice de refracción o la reflectividad no sean independientes. Por el contrario, que estén acopladas a través de una transformada de Hilbert [2]. Esto implica que el conocer la respuesta disipativa [$\varepsilon''(\omega)$] en todo el espectro de frecuencias es, en principio, suficiente para determinar de manera única la respuesta óptica asociada al esparcimiento [$\varepsilon'(\omega)$], y viceversa.

En esta sección se considera un material homogéneo e isótropo, caracterizado por una función óptica lineal compleja, en particular la función dieléctrica, definida en un espacio de frecuencias complejo. El objetivo es derivar las relaciones de KK asociadas a dicha función. Para ello, se emplean las transformadas de Fourier directa e inversa de los campos \mathbf{E} y \mathbf{D} , a partir de las cuales se obtiene una expresión para la permitividad eléctrica relativa. Posteriormente, se imponen condiciones de causalidad sobre esta expresión que permiten garantizar su analiticidad en el semiplano superior del plano complejo de frecuencias y con ello deducir las relaciones de KK.

Las transformadas de Fourier temporales directa e inversa de \mathbf{D} se definen como [5]

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t') e^{i\omega t'} dt', \quad \text{y} \quad \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (1.25)$$

⁹Una función compleja $f(x + iy) = u(x, y) + i v(x, y)$ es analítica si u y v tienen primeras derivadas continuas y satisfacen las ecuaciones de Cauchy-Riemann [7].

respectivamente. Al sustituir la Ec. para \mathbf{D} en (1.5) en la transformada de Fourier inversa de las Ecs. (1.25), se obtiene

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (1.26)$$

y al expresar $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ mediante su transformada de Fourier, la Ec. (1.26) se reescribe como

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t'} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') dt', \quad (1.27)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') e^{i\omega(t-t')} d\omega dt', \quad (1.28)$$

donde además se consideró que los órdenes de integración se pueden intercambiar dado que la integración se realiza en el mismo intervalo $(-\infty, \infty)$. Para imponer las propiedades de causalidad en una única función respuesta $G(\tau)$, con $\tau = t - t'$, donde t es el tiempo de observación y t' todos los demás, se escribe al campo eléctrico como¹⁰

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t - \tau) \delta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t - \tau) e^{-i\omega\tau} d\omega d\tau, \quad (1.30)$$

con $\delta(\tau)$ la delta de Dirac. Al sumar $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t') - \mathbf{E}(\mathbf{r}, t')$ y multiplicar por $\varepsilon_0/\varepsilon_0$ a la Ec. (1.28), simplificando se obtiene

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \int_{-\infty}^{\infty} G(\tau) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t - \tau) d\tau \right], \quad (1.31)$$

donde $G(\tau)$ es [5]

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} - 1 \right] e^{-i\omega\tau} d\omega, \quad (1.32)$$

con $\varepsilon(\omega)/\varepsilon_0$ la permitividad eléctrica relativa. Al aplicar la transformada de Fourier a la Ec. (1.32), se obtiene una expresión para la permitividad eléctrica relativa

$$\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \int_{-\infty}^{\infty} G(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau. \quad (1.33)$$

Las Ecs. (1.31) y (1.32) muestran que el campo de desplazamiento eléctrico al tiempo t depende del campo eléctrico en todos los demás tiempos t' . A esta característica, se le conoce como la no localidad temporal entre \mathbf{D} y \mathbf{E} [5].

De modo que las Ecs. (1.31) y (1.33) sean causales, es necesario imponer condiciones que garanticen que la Ec. (1.32) se anule para $\tau < 0$, lo que se traduce en que al tiempo t , únicamente valores del campo eléctrico previos a ese tiempo determinan el vector de desplazamiento eléctrico [5]. De esta forma, las Ecs. (1.31) y (1.33) se reescriben como

¹⁰Donde se realiza el cambio de variable $\tau = t - t'$ y se emplea la función constante [7]

$$\mathcal{F}[1] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} = \delta(\tau), \quad (1.29)$$

con $\delta(\tau)$ la función delta de Dirac, que cumple con $\int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) \delta(\tau) d\tau = f(0)$ [7].

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \int_0^\infty G(\tau) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t - \tau) d\tau \right], \quad (1.34a)$$

$$\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} - 1 = \int_0^\infty G(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau, \quad (1.34b)$$

donde $\varepsilon(\omega)$ es una función compleja, cuyas partes real e imaginaria se relacionan como $\varepsilon(-\omega)/\varepsilon_0 = \varepsilon^*(\omega^*)/\varepsilon_0$.

Dado que $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ y $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ son funciones reales, $G(\tau)$ también lo es. Si se considera a la Ec. (1.34b) como una representación de $\varepsilon(\omega')/\varepsilon_0$ en el plano complejo, entonces la Ec. (1.34b) es analítica en el semiplano superior complejo siempre que $G(\tau)$ sea finita para toda τ [5]. Para que dicha analiticidad se extienda hasta el eje real, es necesario imponer la condición $G(\tau) \rightarrow 0$ cuando $\tau \rightarrow \infty$ [5]¹¹. Como $\varepsilon(\omega')/\varepsilon_0 - 1$ es una función analítica en el semiplano superior complejo incluyendo el eje real, la función $[\varepsilon(\omega')/\varepsilon_0 - 1]/(\omega' - \omega)$ también lo es, salvo por la singularidad en $\omega' = \omega$. De acuerdo con el teorema integral de Cauchy¹², para un contorno cerrado C que no encierre ω_0 se cumple [7]

$$\oint_C \frac{[\varepsilon(\omega')/\varepsilon_0 - 1]}{\omega' - \omega} d\omega' = 0. \quad (1.35)$$

Para determinar el contorno apropiado de modo que se pueda emplear la Ec. (1.35), se considera a ω un punto sobre el eje real y a C la unión de cuatro curvas con representaciones paramétricas como se muestra en la Fig. 1.3 y que están dadas por [1]

$$\begin{aligned} C_1 : \omega' &= \Omega, & -A \leq \Omega &\leq \omega - a, \\ C_2 : \omega' &= \omega - ae^{-i\Omega}, & 0 \leq \Omega &\leq \pi, \\ C_3 : \omega' &= \Omega, & \omega + a \leq \Omega &\leq A, \\ C_4 : \omega' &= Ae^{i\Omega}, & 0 \leq \Omega &\leq \pi. \end{aligned}$$

Así, la Ec. (1.35) se reescribe como

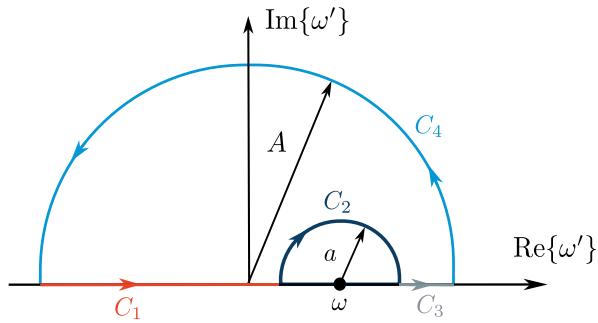


Fig. 1.3: Contorno de integración C conformado por cuatro curvas.

¹¹Esto se cumple para dieléctricos; en conductores, en cambio, se tiene que $G(\tau) \rightarrow \sigma/\varepsilon_0$ cuando $\tau \rightarrow \infty$ [5].

¹²El teorema integral de Cauchy establece que si una función $f(z)$ es analítica dentro y sobre un contorno cerrado C , entonces $\oint_C f(z)/(z - z_0) dz = 0$ [7].

$$\int_A^{\omega-a} \frac{[\varepsilon(\Omega)/\varepsilon_0 - 1]}{\Omega - \omega} d\Omega + \int_{\omega+a}^A \frac{[\varepsilon(\Omega)/\varepsilon_0 - 1]}{\Omega - \omega} d\Omega + \\ + \int_0^\pi \frac{iA e^{i\Omega} [\varepsilon(A e^{i\Omega})/\varepsilon_0 - 1]}{A e^{i\Omega} - \omega} d\Omega - \int_0^\pi i [\varepsilon(\omega - ae^{-i\Omega})/\varepsilon_0 - 1] d\Omega = 0.$$

Integrando por partes la Ec. (1.34b), se obtiene

$$\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} - 1 = \frac{iG^{(0)}(0)}{\omega} - \frac{G^{(1)}(0)}{\omega^2} + \frac{iG^{(2)}(0)}{\omega^3} + \dots,$$

donde $G^{(i)}(\tau)$ indica la i -ésima derivada y donde se empleó que $G(\tau) \rightarrow 0$ cuando $\tau \rightarrow \infty$. Además, dado que $G(\tau)$ es causal, $G(0) = 0$; por lo que el primer término se anula al igual que los términos que decaen más rápido que $1/\omega^2$ a frecuencias altas. Con ello, por el lema de Jordan¹³ la integral sobre el segmento C_4 es [1]

$$\int_0^\pi i [\varepsilon(\omega - ae^{-i\Omega})/\varepsilon_0 - 1] d\Omega = 0. \quad (1.36)$$

Por otro lado, al considerar el límite de $a \rightarrow 0$ y al emplear nuevamente el teorema de Cauchy, la integral sobre el segmento C_2 es [5]

$$\int_0^\pi i [\varepsilon(\omega - ae^{-i\Omega})/\varepsilon_0 - 1] d\Omega = i\pi[\varepsilon(\Omega)/\varepsilon_0 - 1].$$

Finalmente, las integrales sobre los segmentos C_1 y C_3 equivalen a

$$\int_A^{\omega-a} \frac{[\varepsilon(\Omega)/\varepsilon_0 - 1]}{\Omega - \omega} d\Omega + \int_{\omega+a}^A \frac{[\varepsilon(\Omega)/\varepsilon_0 - 1]}{\Omega - \omega} d\Omega = \text{PV} \int_{-\infty}^\infty \frac{[\varepsilon(\Omega)/\varepsilon_0 - 1]}{\Omega - \omega} d\Omega, \quad (1.37)$$

donde P.V. denota el valor principal de la integral [7]. Por lo tanto, se obtiene

$$\text{P.V.} \int_{-\infty}^\infty \frac{[\varepsilon(\omega')/\varepsilon_0 - 1]}{\omega' - \omega} d\omega' = i\pi[\varepsilon(\omega')/\varepsilon_0 - 1]. \quad (1.38)$$

Al separar la Ec. (1.38) en parte real e imaginaria, se obtienen las relaciones de KK

$$\frac{\varepsilon'(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} \text{P.V.} \int_{-\infty}^\infty \frac{\varepsilon''(\omega')/\varepsilon_0}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (1.39)$$

$$\frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon_0} = -\frac{1}{\pi} \text{P.V.} \int_{-\infty}^\infty \frac{[\varepsilon'(\omega')/\varepsilon_0 - 1]}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (1.40)$$

Matemáticamente, la relación entre las Ecs. (1.39) y (1.40) se expresa mediante una transformada de Hilbert¹⁴. En el dominio armónico, esta relación puede interpretarse como un

¹³El lema de Jordan establece que si una función es continua en un contorno semicircular de radio R centrado en el origen y acotada cuando $R \rightarrow \infty$, entonces la integral sobre el contorno semicircular es 0 [7].

¹⁴La transformada de Hilbert $\hat{g}(\omega)$ se define como la convolución de una función $g(\omega)$ con $1/(\pi\omega)$, es decir [11]

$$\hat{g}(\omega) = g(\omega) * \frac{1}{\pi\omega} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{g(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega'.$$

1. ESPARCIMIENTO DE LUZ POR PARTÍCULAS

desfase¹⁵ de $\pi/2$ entre los términos asociados al almacenamiento y a la disipación de energía [3, 12]. A partir de que la propiedad de simetría $\varepsilon(-\omega)/\varepsilon_0 = \varepsilon^*(\omega^*)/\varepsilon_0$, las Ecs. (1.39) y (1.40) se reescriben en frecuencias positivas como

$$\frac{\varepsilon'(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{2}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{[\varepsilon''(\omega')/\varepsilon_0]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad (1.41a)$$

$$\frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon_0} = -\frac{2\omega}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{[\varepsilon'(\omega')/\varepsilon_0 - 1]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'. \quad (1.41b)$$

1.4. Relaciones Kramers-Kronig sustractivas

A pesar de que las relaciones de Kramers-Kronig se han aplicado ampliamente en el análisis de datos experimentales [13], su implementación práctica enfrenta dos limitaciones fundamentales: los errores experimentales y el intervalo finito de frecuencias en el que suelen obtenerse los datos [13]. De hecho, cuando las relaciones de KK se evalúan sobre un rango espectral limitado, el error en la reconstrucción de la parte real o imaginaria de la función óptica tiende a incrementarse monótonamente con la frecuencia [14]. Para mitigar este problema, Bachrach y Brown [15] propusieron las relaciones de Kramers-Kronig sustractivas (SSKK), las cuales incorporan un punto de anclaje experimental es decir, el valor conocido de la función óptica en una frecuencia particular, con el fin de mejorar significativamente la precisión del análisis vía KK [2]. En esta sección se desarrollan las relaciones SSKK para la función dieléctrica considerando un punto de referencia en una frecuencia ω_1 , cuyo valor experimental se asume conocido y se puede escribir como

$$\frac{\varepsilon'(\omega_1)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{2}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{\varepsilon''(\omega')/\varepsilon_0}{\omega' - \omega_1} d\omega', \quad (1.42)$$

$$\frac{\varepsilon''(\omega_1)}{\varepsilon_0} = -\frac{2\omega_1}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{[\varepsilon'(\omega')/\varepsilon_0 - 1]}{\omega' - \omega_1} d\omega'. \quad (1.43)$$

Al restar la Ec. (1.42) de la relación de KK correspondiente para una ω arbitraria se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon'(\omega)}{\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon'(\omega_1)}{\varepsilon_0} &= \frac{2}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{\omega'(\omega'^2 - \omega_1^2)(\varepsilon''(\omega)/\varepsilon_0) - \omega'(\omega'^2 - \omega^2)(\varepsilon''(\omega)/\varepsilon_0)}{(\omega'^2 - \omega^2)(\omega'^2 - \omega_1^2)} d\omega', \\ &= \frac{2(\omega^2 - \omega_1^2)}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon''(\omega')/\varepsilon_0}{(\omega'^2 - \omega^2)(\omega'^2 - \omega_1^2)} d\omega', \end{aligned} \quad (1.44)$$

y de manera análoga para la parte imaginaria, al restar la Ec. (1.43) de la relación de KK correspondiente para una ω arbitraria se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon''(\omega_1)}{\varepsilon_0} &= \frac{2}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{\omega(\omega'^2 - \omega_1^2)(\varepsilon'(\omega)/\varepsilon_0 - 1) - (\omega'^2 - \omega^2)(\varepsilon'(\omega)/\varepsilon_0 - 1)}{(\omega'^2 - \omega^2)(\omega'^2 - \omega_1^2)} d\omega', \\ &= -\frac{2}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{(\omega - \omega_1)(\omega'^2 + \omega\omega_1)(\varepsilon'(\omega') - 1)/\varepsilon_0}{(\omega'^2 - \omega^2)(\omega'^2 - \omega_1^2)} d\omega'. \end{aligned} \quad (1.45)$$

¹⁵La transformada inversa de Fourier de $1/(\pi\omega)$ es $i \operatorname{sgn}(t)$, donde $\operatorname{sgn}(\cdot)$ denota la función signo. En el plano complejo, multiplicar cualquier número por i equivale a una rotación de $\pi/2$ [11].

Así, al simplificar las Ecs. (1.44) y (1.45), se obtienen las relaciones SSKK [2]

$$\frac{\varepsilon'(\omega)}{\varepsilon_0} = \frac{\varepsilon'(\omega_1)}{\varepsilon_0} + \frac{2(\omega^2 - \omega_1^2)}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon''(\omega')/\varepsilon_0}{(\omega'^2 - \omega^2)(\omega'^2 - \omega_1^2)} d\omega', \quad (1.46a)$$

$$\frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon_0} = \frac{\varepsilon''(\omega_1)}{\varepsilon_0} - \frac{2(\omega - \omega_1)}{\pi} \text{P.V.} \int_0^\infty \frac{[\omega'^2 + \omega \omega_1][\varepsilon'(\omega') - 1]/\varepsilon_0}{(\omega'^2 - \omega^2)(\omega'^2 - \omega_1^2)} d\omega'. \quad (1.46b)$$

Las relaciones SSKK permiten mitigar los errores asociados al truncamiento espectral al incorporar, mediante puntos de anclaje, contribuciones provenientes de frecuencias fuera de la ventana de medición [2]. Debido a la propiedad de causalidad de las relaciones KK, las relaciones SSKK preservan las propiedades de analiticidad en el semiplano superior complejo y constituyen un resultado exacto [12].

Capítulo 2

Eritrocitos y sus patologías

En este capítulo se estudia la morfología, la composición y las principales alteraciones patológicas de los eritrocitos, y se derivan las funciones dieléctricas correspondientes a distintas concentraciones de hemoglobina a partir de datos reportados en la literatura. En la primera parte se describe la composición y las características generales de la sangre, para posteriormente centrarse en los eritrocitos, analizando su forma, su variabilidad morfológica y los cambios en la concentración de hemoglobina corporcular media (CHCM) asociados a diversas enfermedades. En la segunda parte se introduce un modelo geométrico del eritrocito basado en óvalos de Cassini, el cual permite representar de manera realista su forma bicóncava [16]. A continuación, se presentan y analizan las propiedades ópticas de los eritrocitos y del plasma en el rango ultravioleta-visible (UV-Vis), con énfasis en la dependencia de la función dieléctrica con la CHCM. Se discuten los datos experimentales disponibles para las partes real e imaginaria del índice de refracción de la hemoglobina a distintas concentraciones y su formulación en términos del incremento refractivo específico [17]. Con el fin de obtener representaciones analíticas de los datos experimentales, la parte imaginaria de la función dieléctrica se ajusta mediante un modelo de osciladores de Lorentz y la parte real se reconstruye empleando las relaciones SSKK. Finalmente, se interpretan las principales características espectrales de la hemoglobina, en particular la banda de Soret en el UV-Vis y las bandas Q en el visible, que dominan la respuesta óptica de los eritrocitos [18].

2.1. Morfología y alteraciones

La sangre humana está compuesta principalmente por eritrocitos —también conocidos como glóbulos rojos (RBCs, por sus siglas en inglés)—, leucocitos, plaquetas y plasma sanguíneo [19]. El plasma constituye el medio continuo en el que se encuentran suspendidos estos elementos y está formado por agua, electrolitos, proteínas plasmáticas, carbohidratos, lípidos y diversas vesículas extracelulares [19]. Si bien el plasma presenta absorción y esparcimiento óptico, originados principalmente por proteínas como la albúmina y el fibrinógeno, así como por las plaquetas, su contribución a la respuesta óptica global de la sangre en el rangopectral de 250 nm a 1100 nm es despreciable [20]. No obstante, bajo ciertas condiciones patológicas, la absorción del plasma puede incrementarse [21]. Dentro de ese mismo rangopectral, la respuesta electromagnética de la sangre está dominada por los eritrocitos, cuya contribución puede superar hasta por tres órdenes de magnitud la de los demás componentes, debido al contraste entre su

2. ERITROCITOS Y SUS PATOLOGÍAS

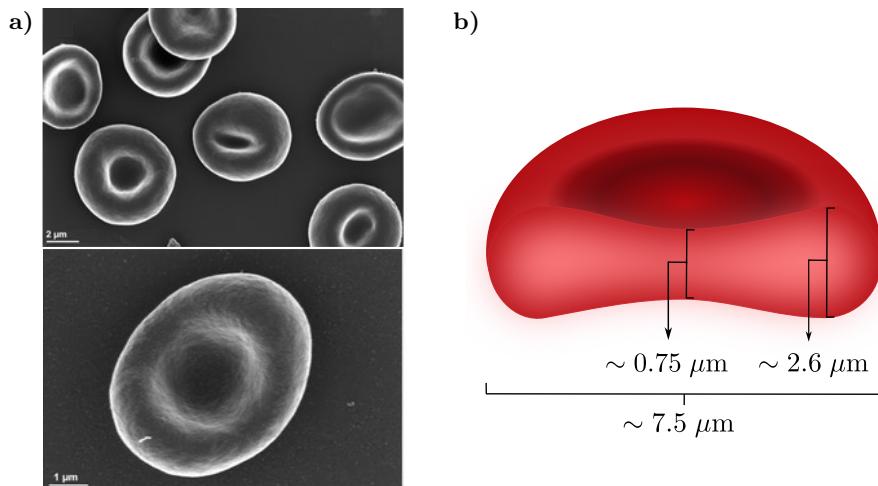


Fig. 2.1: Estructura de un eritrocito sano. a) Micrografías SEM de eritrocitos de pacientes sanos. La micrografía superior muestra eritrocitos de forma bicóncava normal con interacción limitada, mientras que la inferior muestra un eritrocito sano con una membrana ligeramente granular; imágenes extraídas y adaptadas de [24]. b) Diagrama de un corte de un eritrocito que muestra las dimensiones de la célula.

índice de refracción y el del plasma [21]. Por ello, para describir la interacción luz–sangre, en este trabajo se consideran únicamente a los eritrocitos y al plasma: el primero actúa como la partícula esparcidora y el segundo como el medio circundante.

Los eritrocitos son células terminalmente diferenciadas¹⁶ que carecen de núcleo y están constituidas casi por completo de hemoglobina, la proteína responsable de sus características de absorción óptica [21]. A su vez, la hemoglobina presenta firmas espectrales definidas en el rango entre 250–1100 nm, las cuales dependen de su estado químico, principalmente oxihemoglobina (HbO_2) y desoxihemoglobina (Hb) [21]. A través de la hemoglobina, los eritrocitos desempeñan su función fisiológica fundamental de transporte de oxígeno [23]. La eficiencia de este proceso se encuentra relacionada con la geometría de los eritrocitos. Estas células poseen una membrana sostenida por un citoesqueleto altamente flexible que les confiere su morfología característica [23], que se observa en la micrografía electrónica de barrido (SEM por sus siglas en inglés) mostrada en la Fig. 2.1a), tomada de [24]. Como se observa en el diagrama de un corte axial de un eritrocito en la Fig. 2.1b), los eritrocitos sanos presentan un contorno ovalado y un diámetro promedio de aproximadamente $7.5 \mu\text{m}$. Su forma incluye una depresión central que reduce el espesor en la región media, dando lugar a un disco bicóncavo con un grosor aproximado de $2.6 \mu\text{m}$ en los bordes y $0.75 \mu\text{m}$ en el centro [23]. Esta geometría no solo es fundamental para su función fisiológica, al proporcionar una alta relación superficie-volumen y facilitar el intercambio de gases [23], sino que también influye directamente en su comportamiento óptico y en la manera en que esparcen la luz [21].

La geometría, el tamaño y el índice de refracción de los eritrocitos son susceptibles a alteraciones con relevancia clínica, influyendo tanto en su funcionalidad fisiológica como en su

¹⁶Una célula terminalmente diferenciada se define como aquella que, al adquirir funciones especializadas, pierde su capacidad de proliferar de manera irreversible. Por ejemplo, los eritrocitos y queratinocitos de los mamíferos, sufren una detención irreversible de su crecimiento al perder su núcleo durante la diferenciación terminal [22].

2.1 Morfología y alteraciones

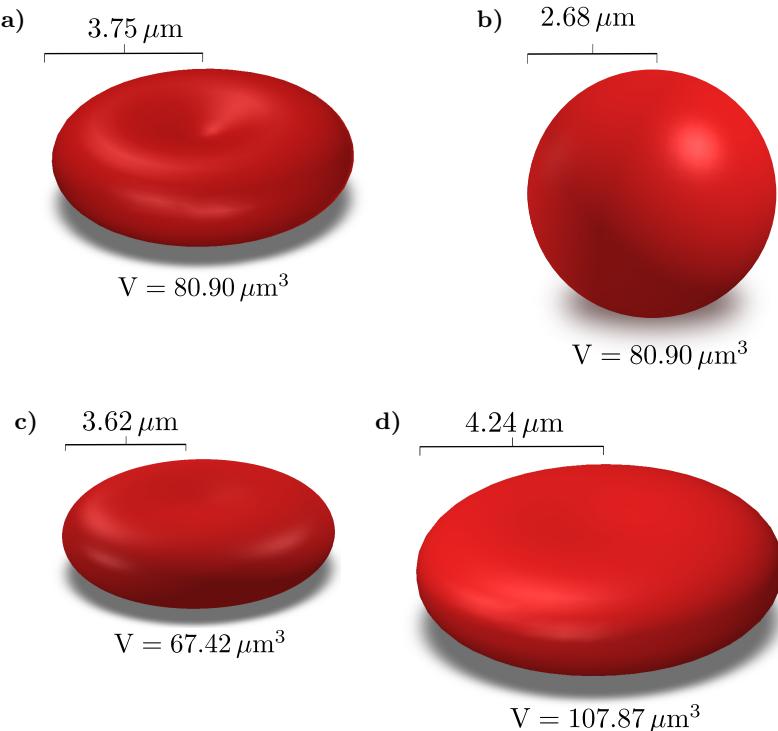


Fig. 2.2: Morfologías de eritrocitos sanos y patológicos. **a)** Eritrocito sano con forma bicóncava y radio menor a $3.75 \mu\text{m}$. **b)** Esferocito: eritrocito con el mismo volumen que un eritrocito sano pero con radio menor. **c)** Microcito: eritrocito de menor tamaño que uno sano. Conserva la forma bicóncava. **d)** Macrocito: eritrocito de mayor tamaño que uno sano. Conserva la forma bicóncava.

comportamiento óptico [25]. Bajo diversas patologías y condiciones hematológicas, los eritrocitos pueden experimentar modificaciones significativas en su morfología y composición. Una de las condiciones más frecuentes es la anemia, definida como una disminución en la capacidad de transporte de oxígeno de la sangre [26]. Esta no se considera una enfermedad en sí misma, sino una manifestación clínica de un trastorno o deficiencia subyacente, y puede reflejarse en alteraciones en el número de eritrocitos, su tamaño o su contenido de hemoglobina [26]. Su clasificación suele basarse en parámetros hematológicos, como la CHCM, que cuantifica la concentración promedio de hemoglobina en el eritrocito [21], y en su morfología, incluyendo el radio y el volumen celular. La Fig. 2.2a) presenta un eritrocito sano, con las dimensiones indicadas previamente en la Fig. 2.1b). Un eritrocito sano presenta valores de CHCM entre 30 y 32 g/dL [27]. En contraste, la Fig. 2.2b) muestra un eritrocito afectado por esferocitosis hereditaria, caracterizado por tener un volumen igual o similar al de un eritrocito sano, pero con una superficie celular reducida debido a defectos en las proteínas responsables de mantener la unión adecuada entre el citoesqueleto y la bicapa lipídica [28]. Como consecuencia, la célula adquiere una forma esférica con una menor relación superficie-volumen y posee valores de CHCM mayores a 32 g/dL [27]. Esta alteración incrementa la tensión de membrana y la vuelve más frágil e incapaz de adaptarse a variaciones fisiológicas [28]. La Fig. 2.2c) muestra un eritrocito con microcitosis, definido como un eritrocito de tamaño reducido (diámetro menor que $7 \mu\text{m}$ y, a menudo, CHCM menor que 30 g/dL) [27]. Suelen asociarse con hipocromía y con trastornos que afectan el metabolismo del hierro o la síntesis de hemoglobina [25]. Por otro lado, en la Fig. 2.2d) se observa un eritrocito con macrócitosis, identificado por un diámetro mayor a $8.5 \mu\text{m}$ y CHCM de aproximadamente

2. ERITROCITOS Y SUS PATOLOGÍAS

34 g/dL [27]. Aunque su forma puede seguir siendo bicóncava, su tamaño aumentado suele relacionarse con alcoholismo crónico, enfermedades hepáticas, deficiencias vitamínicas, mieloma o leucemia [25].

Las modificaciones en la geometría (radio celular y volumen) y la composición interna (CHCM) que caracterizan a estas alteraciones, modifican el índice de refracción y las propiedades de esparcimiento óptico de los eritrocitos [21]. Por lo tanto, en el estudio de las propiedades ópticas de la sangre en estas condiciones se requiere la implementación de modelos que contemplen con precisión la morfología y la composición interna de los glóbulos rojos patológicos, estableciendo un contraste con las propiedades de los eritrocitos sanos.

2.2. Modelado y propiedades ópticas

Para modelar la morfología bicóncava característica de los eritrocitos, se han propuesto diversos enfoques analíticos, entre los que destacan los modelos de Skalak [29], Lu [30], Fung [31], y los óvalos de Cassini [16]. En este trabajo se emplea el modelo basado en óvalos de Cassini, debido a su simplicidad analítica y su capacidad para reproducir fielmente la morfología promedio de un eritrocito sano, optimizando el costo computacional en simulaciones de esparcimiento [16]. Los óvalos de Cassini son curvas planas definidas como el lugar geométrico de los puntos cuyo producto de distancias a dos focos fijos es constante; esto los distingue de las elipses, donde se conserva la suma de dichas distancias [32]. Al rotar un óvalo de Cassini alrededor de su eje de simetría, se genera un sólido de revolución con la geometría de un disco bicóncavo. En coordenadas cartesianas, asumiendo simetría respecto al eje z , la superficie se describe mediante la expresión [16]

$$z(x) = \pm c \sqrt{-a^2 - x^2 \pm \sqrt{4x^2a^2 + b^4}}, \quad (2.1)$$

donde los signos \pm externos definen la simetría respecto al plano XY, mientras que los internos delimitan las ramas del óvalo. Los parámetros geométricos se interpretan de la siguiente manera: a representa la semidistancia focal, b es la raíz cuadrada del producto constante de las distancias a los focos, y c es un factor de escala que ajusta el espesor máximo sin cambiar su radio [32]. La relación entre estos parámetros delimita la forma del eritrocito: un incremento en a acentúa la depresión central (bicóncavidad), mientras que valores menores de a derivan en geometrías convexas o incluso esferoidales. Por su parte, b escala las dimensiones globales de la curva, controlando así el volumen total [16]. En la Fig. 2.3 se muestra un modelo con parámetros $a = 2.6 \mu\text{m}$, $b = 2.7 \mu\text{m}$ y $c = 0.8 \mu\text{m}$, los cuales corresponden a un eritrocito sano con un volumen de $79.2 \mu\text{m}^3$. La Fig. 2.3a) muestra la sección transversal en donde se identifican en color rojo los dos focos (F_1, F_2) del óvalo separados uno del otro a una distancia focal de $2a$. Además, se muestra el valor de c sobre el eje z y se muestran en color gris las distancias entre los puntos focales y un punto arbitrario P , cuyo producto determina el valor de b . La Fig. 2.3b) presenta el corte del sólido de revolución resultante.

La descripción morfológica proporcionada por los óvalos de Cassini define el dominio espacial ocupado por la partícula; no obstante, la respuesta electromagnética y, en particular,

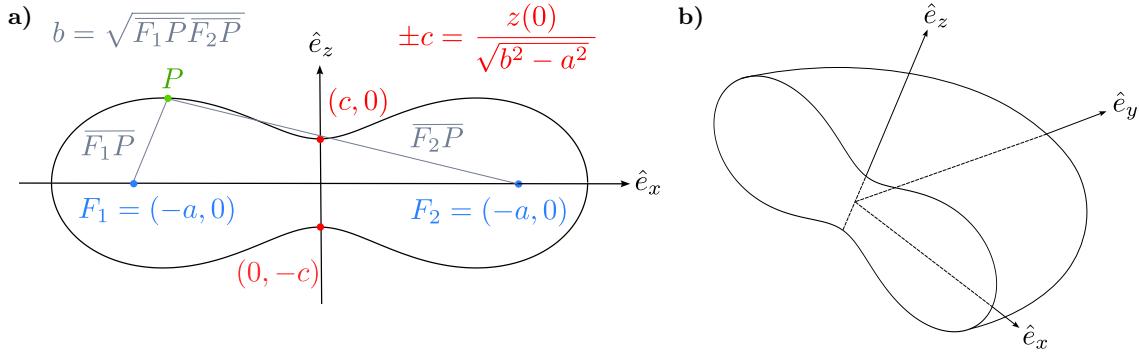


Fig. 2.3: Óvalo de Cassini con valores de $a = 2.6 \mu\text{m}$, $b = 2.7 \mu\text{m}$ y $c = 0.8 \mu\text{m}$ que representa a un eritrocito sano con volumen de $79.2 \mu\text{m}^3$. **a)** Forma bidimensional. Los focos (F_1, F_2) se identifican con color azul y se encuentran separados a una distancia de $2a$. Se muestra en color rojo el valor de c para el caso particular sobre el eje z . Además, se observan en color gris las distancias entre los puntos focales y un punto arbitrario P , cuyo producto determina el valor de b . **b)** Corte del sólido de revolución resultante.

los procesos de esparcimiento y absorción de la luz, están determinados por el contraste entre las propiedades ópticas del eritrocito y las del plasma [21]. En el caso de los eritrocitos, su función dieléctrica está dada por la hemoglobina, por lo que variaciones de la CHCM modifican la respuesta óptica efectiva de la célula [21]. Experimentalmente, los valores del índice de refracción de la hemoglobina se han obtenido a partir de mediciones de transmitancia y reflectancia mediante el uso de esferas integradoras y técnicas espectroscópicas [20, 33]. No obstante, la mayoría de los datos disponibles en la literatura para distintas concentraciones de hemoglobina se encuentran restringidos a ventanas espectrales finitas.

Los datos experimentales de la parte real e imaginaria del índice de refracción de la oxihemoglobina empleados en este trabajo corresponden a tres valores de la CHCM¹⁷: 28.7 g/dL [17], 30.6 g/dL [33] y 34.0 g/dL [33]. En este trabajo se optó por emplear las propiedades ópticas de la oxihemoglobina, dado que las condiciones hematológicas analizadas se caracterizan principalmente por alteraciones en el tamaño, volumen y concentración de hemoglobina de los eritrocitos, sin implicar necesariamente variaciones en el estado de oxigenación de la hemoglobina [26]. Los valores de CHCM considerados fueron seleccionados con el propósito de representar los distintos escenarios patológicos descritos en la sección anterior. La parte real del índice de refracción para todas las concentraciones se reporta en términos de la relación [17]

$$\eta_{\text{Hb}}(\lambda, c_{\text{Hb}}) = n_{\text{H}_2\text{O}}(\lambda) [\beta(\lambda)c_{\text{Hb}} + 1], \quad (2.2)$$

donde $n_{\text{H}_2\text{O}}(\lambda)$ es el índice de refracción del agua, $\beta(\lambda)$ es el incremento refractivo específico de la hemoglobina y c_{Hb} es la concentración de hemoglobina. En la Fig. 2.4a) se muestra la dependenciapectral de $\beta(\lambda)$ en función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior), donde los puntos indican los datos experimentales y la línea continua una interpolación. En la región ultravioleta se observa dispersión anómala, mientras que en los intervalos 310–355 nm y 500–1100 nm las variaciones de β no son significativas: la desviación estándar del promedio en dichos rangos es del orden de 3.6×10^{-5} , comparable con el error experimental reportado para

¹⁷La CHCM cuantifica la concentración total de hemoglobina intracelular y no distingue entre oxihemoglobina y desoxihemoglobina. En consecuencia, el uso de propiedades ópticas de la oxihemoglobina es consistente con la definición de CHCM y con su empleo en modelos ópticos de sangre bajo condiciones fisiológicas promedio [21].

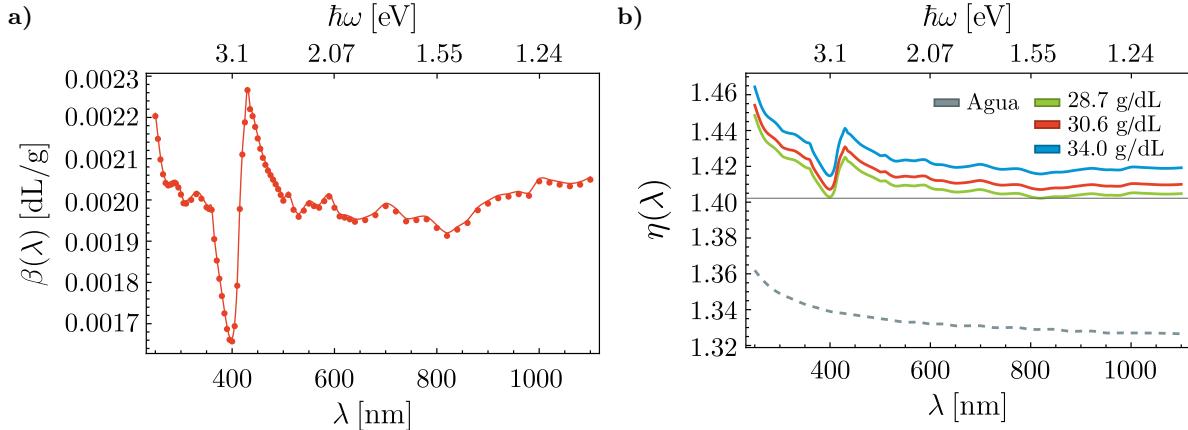


Fig. 2.4: Datos empleados reportados en [20] para el índice de refracción de la hemoglobina a distintas concentraciones como función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior). **a)** Incremento refractivo específico $[\beta(\lambda)]$ de la hemoglobina. Los puntos rojos representan datos experimentales y la línea continua una interpolación. **b)** Parte real del índice de refracción de la hemoglobina para distintas concentraciones: 28.7 g/dL, 30.6 g/dL y 34.0 g/dL indicados mediante las líneas continuas verde, roja y azul, respectivamente. La línea gris punteada corresponde a la parte real del índice de refracción del agua.

mediciones a una longitud de onda dada [17]. En la Fig. 2.4b) se presentan las curvas de la parte real del índice de refracción obtenidas a partir de la Ec. (2.2) para las distintas concentraciones: la curva verde para 28.7 g/dL, la roja para 30.6 g/dL y la azul para 34.0 g/dL en función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior). La curva gris punteada representa la parte real del índice de refracción del agua, incluida como referencia. La comparación entre las curvas correspondientes a distintas concentraciones de hemoglobina muestran la dependencia lineal de n_{Hb} con c_{Hb} . En cuanto a la parte imaginaria, para la concentración de 28.7 g/dL se dispone de datos en el intervalo espectral de 250 nm a 1100 nm. En contraste, para las concentraciones de 30.6 g/dL y 34 g/dL la información experimental de la parte imaginaria sólo está disponible en el rango de 300 a 600 nm. Para el plasma, se emplearon los datos de la parte real reportados en [34] y de la parte imaginaria en [20], ambos en el intervalo espectral comprendido entre 400 nm y 750 nm.

Con el fin de disponer de una representación continua y analítica de la función dieléctrica en todo el rango del visible, la parte imaginaria de la función dieléctrica de los eritrocitos y del plasma se ajustó mediante un modelo de osciladores de Lorentz¹⁸. Esta elección, aunque no es única, resulta particularmente conveniente porque proporciona una expresión analítica que, por construcción, satisface el principio de causalidad [36] y, por lo tanto, es compatible con las relaciones de KK. El ajuste se realizó por mínimos cuadrados entre los datos experimentales y el modelo propuesto, empleando un número finito de osciladores (véase el Apéndice A). En la Fig. 2.5a) se muestran los datos experimentales correspondientes a la parte imaginaria de la función dieléctrica de un eritrocito sano con una CHCM de 30.6 g/dL, extraídos de [33] (puntos rojos), junto con el ajuste obtenido mediante osciladores de Lorentz (línea azul continua) en función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior). De manera análoga, en la Fig. 2.5b) se presentan los datos experimentales de la parte imaginaria de la función dieléctrica del plasma (puntos rojos) y su correspondiente ajuste mediante osciladores de

¹⁸En este modelo, los electrones del material se describen como osciladores armónicos amortiguados con frecuencias de resonancia características, sometidos a la acción de un campo electromagnético externo [35].

2.2 Modelado y propiedades ópticas

Lorentz (línea azul continua). En ambos casos, las líneas grises verticales indican las frecuencias de resonancia asociadas a los osciladores empleados.

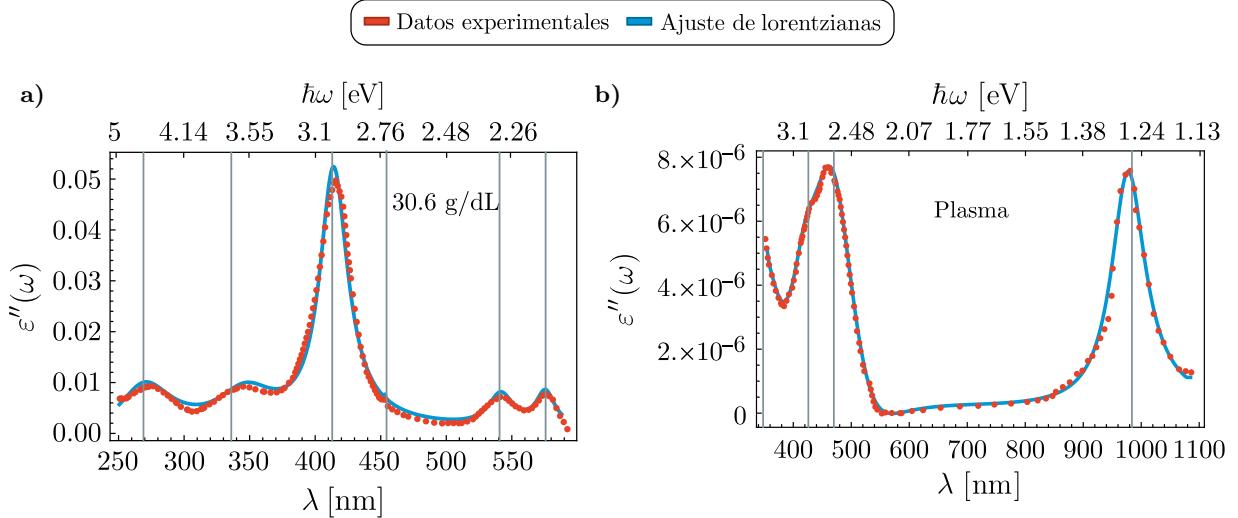


Fig. 2.5: Parte imaginaria de la función dieléctrica como función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior). **a)** Función dieléctrica de eritrocitos con una concentración de 30.6 g/dL. Los datos experimentales se obtuvieron de [33] y están indicados mediante puntos rojos. La línea azul continua representa el ajuste con lorentzianas obtenido. **b)** Función dieléctrica del plasma, cuyos datos experimentales representados por puntos rojos se extrajeron de [20]. La línea azul continua representa el ajuste con lorentzianas obtenido. En ambas figuras las líneas grises verticales indican las frecuencias de resonancia asociadas a los osciladores de Lorentz empleados en el ajuste.

Dado que los datos experimentales disponibles cubren únicamente ventanas espectrales finitas, los ajustes con lorentzianas no incorporan de manera explícita las contribuciones asociadas a transiciones electrónicas situadas más allá del UV-Vis. En consecuencia, la aplicación directa de las relaciones de KK a esta ventana espectral finita conduciría a inconsistencias entre las partes real e imaginaria de la función dieléctrica. Para mitigar este problema se emplearon las relaciones SSKK, las cuales introducen el valor de la parte real o imaginaria de la función dieléctrica a una frecuencia conocida, llamada frecuencia de anclaje (ω_1), lo que permite reducir los errores asociados al truncamiento espectral [2]. En este trabajo se consideró una energía de anclaje ($\hbar\omega_1$) que se determinó mediante un ajuste minimizando el error global entre la parte real experimental de la función dieléctrica y la obtenida a partir de las relaciones SSKK (ver Apéndice B). Se obtuvieron valores de 3.41 eV, 3.39 eV y 3.4 eV para las concentraciones de hemoglobina de 28.7 g/dL, 30.6 g/dL y 34.0 g/dL, respectivamente, y de 2.39 eV para el plasma. En la Fig. 2.6a) se muestra la comparación entre la parte real de la función dieléctrica reconstruida mediante SSKK, indicada mediante la línea azul continua, y los datos experimentales para una CHCM de 30.6 g/dL indicados mediante los puntos rojos, observándose una desviación promedio de 0.03. La línea continua que se observa es únicamente una guía al ojo. De manera análoga, la Fig. 2.6b) muestra la parte real de la función dieléctrica obtenida mediante el análisis de SSKK como una línea azul continua, donde se observa una desviación promedio de 0.015 respecto a los datos experimentales (puntos rojos). Esta diferencia, particularmente en el ultravioleta se debe a que se ha reportado que el índice de refracción de soluciones de hemoglobina y del plasma presenta un incremento pronunciado en el ultravioleta profundo, asociado principalmente a la absorción del agua [21]. Este comportamiento no se reproduce completamente en el presente análisis, ya

2. ERITROCITOS Y SUS PATOLOGÍAS

que los espectros de absorción disponibles para la hemoglobina y el plasma —y, por ende, la parte imaginaria de la función dieléctrica empleada— sólo se extienden hasta aproximadamente 250 nm y 300 nm, respectivamente. A pesar de esta limitación, la aplicación de las relaciones SSKK permite obtener una reconstrucción cuya desviación promedio con respecto a los datos experimentales es casi tres veces menor que la reportada en [21], donde se emplean únicamente las relaciones de Kramers–Kronig estándares [ver Apéndice B]. En principio, la extensión de los datos experimentales a un rangopectral más amplio [2] o el uso de múltiples frecuencias de anclaje mediante relaciones MSKK¹⁹ permitiría mejorar la reconstrucción de la función dieléctrica en la región ultravioleta.

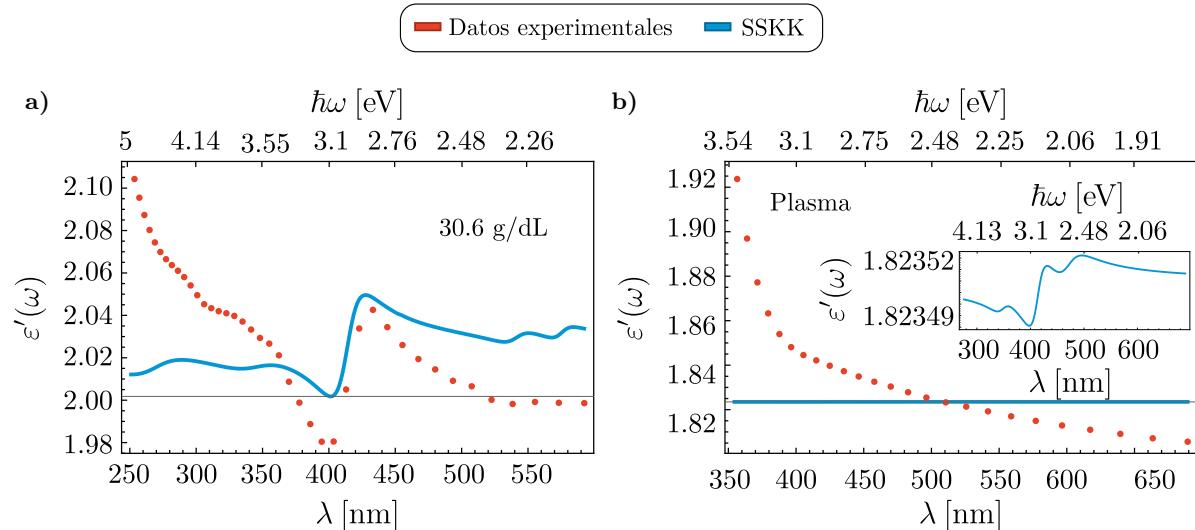


Fig. 2.6: Comparación entre la parte real de la función dieléctrica reconstruida mediante las relaciones SSKK (línea azul continua) y los datos experimentales (puntos rojos) en función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior) para: a) eritrocitos con una CHCM de 30.6 g/dL, a partir de los datos reportados en [33], donde la línea roja continua que se observa es una guía al ojo; y b) plasma, empleando los datos experimentales de [20].

Cabe destacar que, aunque para la concentración de 28.7 g/dL se dispone de datos experimentales tanto de la parte real como de la imaginaria en un intervalopectral relativamente amplio, en este trabajo se empleó de manera consistente la función dieléctrica reconstruida mediante el mismo procedimiento (ajuste con osciladores de Lorentz seguido de SSKK) para las tres concentraciones consideradas. Esta elección garantiza que todas las funciones dieléctricas estén sujetas a los mismos efectos de truncamiento spectral, de modo que las comparaciones posteriores de las propiedades ópticas calculadas reflejen exclusivamente la variación de la CHCM y no diferencias metodológicas en el tratamiento de los datos.

En la Fig. 2.7 se muestran ϵ' [Fig. 2.7a)] y ϵ'' [Fig. 2.7b)] en función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior) para las distintas concentraciones de hemoglobina consideradas: verde para 28.7, rojo para 30.6 g/dL y azul para 34.0 g/dL. En todas las curvas destaca la banda de Soret, característica de la hemoglobina, con un máximo situado típicamente en el intervalo 410–430 nm [21], cuya intensidad es considerablemente mayor que la

¹⁹Las relaciones de Kramers–Kronig generalizadas con sustracciones múltiples (MSKK) permiten introducir varias frecuencias de anclaje para mejorar la precisión del análisis [37].

2.2 Modelado y propiedades ópticas

de las transiciones en el visible. En esta última región se observan las denominadas bandas Q, correspondientes a la banda α (a mayor longitud de onda) y la banda β (a menor longitud de onda), cuyos máximos se localizan de manera general en los rangos aproximados 600–650 nm y 520–580 nm [18], respectivamente, dependiendo de la concentración y del estado de oxigenación²⁰. Las regiones sombreadas en la Fig. 2.7 señalan las bandas espectrales mencionadas anteriormente. De manera adicional, tanto en la parte real como en la imaginaria se aprecia un relieve alrededor de 450 nm, que coincide con el flanco de la banda de Soret y marca la transición entre el régimen de dispersión anómala en el UV-Vis y el comportamiento más suave característico del visible.

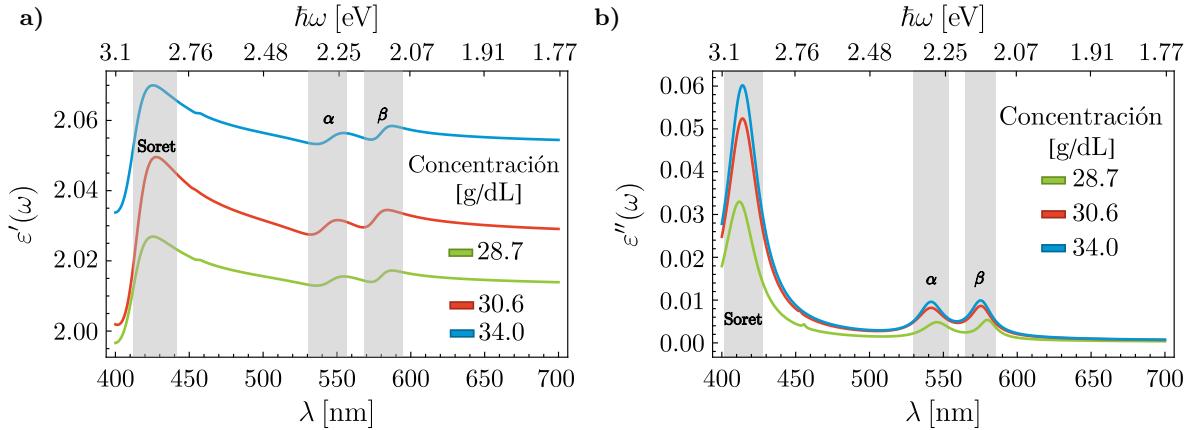


Fig. 2.7: Función dieléctrica de eritrocitos en función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior) para distintas concentraciones de hemoglobina, indicadas mediante líneas continuas verde, roja y azul correspondientes a 28.7 g/dL, 30.6 g/dL y 34 g/dL, respectivamente. Las regiones sombreadas señalan las bandas espectrales que dominan la respuesta óptica de los eritrocitos en el ultravioleta y el visible. **a)** Parte real de la función dieléctrica. **b)** Parte imaginaria de la función dieléctrica.

²⁰Estas bandas se originan en transiciones electrónicas $\pi \rightarrow \pi^*$ del anillo de porfirina. Tanto la banda de Soret (UV-Vis) como las bandas Q (visible) son sensibles al estado de oxidación del hierro y a cambios conformacionales de la hemoglobina, por lo que caracterizan su estructura y función [18].

Técnica de integración finita

La Técnica de Integración Finita (FIT), propuesta por primera vez por Weiland en 1976/1977 [1]. Este método numérico proporciona un esquema universal de discretización espacial. La Técnica de Integración Finita (FIT) reescribe las ecuaciones de Maxwell en su forma integral en una formulación discreta. El conjunto de ecuaciones algebraicas resultante, las Ecuaciones de Cuadrícula de Maxwell (MGE), son muy adecuadas para el análisis numérico.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

3.1. Celda dual

La Técnica de integración finita consiste en que a diferencia de FEM, las componentes del campo eléctrico y del campo magnético se definen en posiciones espaciales distintas dentro de cada celda [**yeeNumericalSolutionInitial1966**]. En particular, las componentes del campo eléctrico se evalúan en los centros de las aristas de la celda, mientras que las componentes del campo magnético se definen en los centros de las caras. Esta disposición escalonada introduce de manera natural el concepto de malla dual. En este formalismo, el dominio computacional se discretiza mediante una malla primaria (primal grid), sobre la cual se definen ciertas magnitudes electromagnéticas, y una malla dual asociada, desplazada ortogonalmente respecto a la primera, donde se definen

3. TÉCNICA DE INTEGRACIÓN FINITA

las magnitudes complementarias [tafloveComputationalElectrodynamicsFinite2005]. En particular, los campos eléctricos se asocian típicamente a las aristas de la malla primaria, mientras que los campos magnéticos se asocian a las caras de la malla dual. Esta correspondencia refleja directamente la formulación integral de las ecuaciones de Maxwell, en la cual los campos se interpretan como cantidades promediadas sobre líneas, superficies o volúmenes.

Desde el punto de vista computacional, esta estructura de mallas duales se implementa explícitamente en herramientas como CST Microwave Studio®. Si bien el usuario visualiza principalmente la malla primaria en el entorno gráfico, internamente el solver construye una segunda malla dual, ortogonal a la primera. La discretización espacial de las ecuaciones de Maxwell se lleva a cabo simultáneamente sobre ambos sistemas de malla, lo que permite introducir los grados de libertad del problema en términos de cantidades integrales definidas sobre los elementos geométricos discretos.

Dentro de este marco de discretización basado en mallas duales, una cuestión central en la formulación de cualquier método numérico es la elección adecuada de las magnitudes desconocidas que se calcularán, es decir, las variables de estado del modelo. Dependiendo del enfoque adoptado, dichas variables pueden corresponder a potenciales vectoriales, potenciales escalares, potenciales de Hertz, componentes de los campos electromagnéticos o magnitudes derivadas de éstos. En el método de Integración Finita se adopta una formulación intrínsecamente integral, en la cual las variables de estado no son los campos puntuales, sino las denominadas tensiones y flujos de malla. Estas magnitudes escalares se definen como integrales de los campos eléctrico y magnético a lo largo de los elementos geométricos de las mallas primaria y dual, respectivamente.

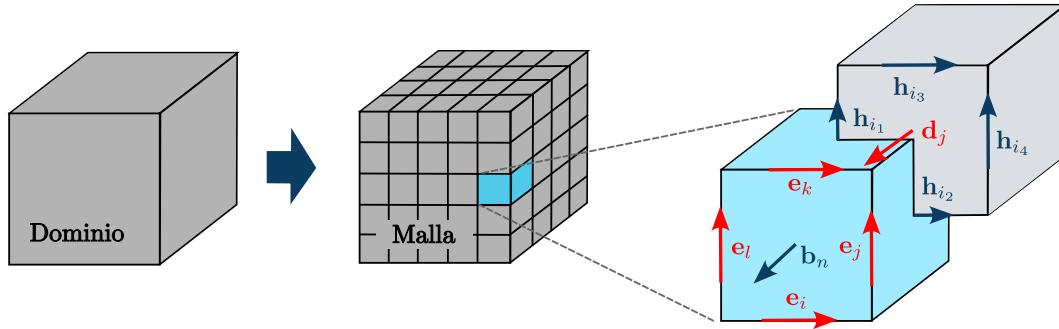


Fig. 3.1: Contorno de integración C conformado por cuatro curvas.

3.2. Maxwell Grid Equations

En unidades del Sistema Internacional (SI), las ecuaciones de Maxwell se expresan en forma diferencial como [4]

3.3 Convergencia

$$\oint_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{a} = \frac{Q_{\text{tot}}^{\text{enc}}}{\epsilon_0}, \quad (\text{Ley de Gauss eléctrica}) \quad (3.1a)$$

$$\oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} = 0, \quad (\text{Ley de Gauss magnética}) \quad (3.1b)$$

$$\oint_{\partial S} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{d}{dt} \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a}, \quad (\text{Ley de Faraday-Lenz}) \quad (3.1c)$$

$$\oint_{\partial S} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{l} = \mu_0 I_{\text{tot}}^{\text{atrav}} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{d}{dt} \int_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{a}, \quad (\text{Ley de Ampère-Maxwell}) \quad (3.1d)$$

donde se obvian las dependencias espaciales y temporales y \mathbf{J}_{tot} es la densidad volumétrica de corriente total; ϵ_0 es la permitividad eléctrica en el vacío y μ_0 la permeabilidad magnética en el vacío.

Considerando la ley de Faraday, la integral cerrada del lado izquierdo de la ecuación puede reescribirse como la suma de cuatro voltajes de red sin introducir errores adicionales. En consecuencia, la derivada temporal del flujo magnético definido en la faceta de la celda primaria cerrada representa el lado derecho de la ecuación, como se ilustra en la figura siguiente. Al repetir este procedimiento para todas las facetas de celda disponibles, la regla de cálculo puede resumirse en una elegante formulación matricial, introduciendo la matriz topológica C como el equivalente discreto del operador rotacional analítico:

3.3. Convergencia

La convergencia se realizó comparando la solución analítica conocida para un esfera: solución de Mie y los datos obtenidos en CST. La convergencia se realizó considerando una esfera de 2680 nm con la función dieléctrica de un eritrocito con CHCM de 30.6 g/dL e inmersa en plasma confunción dieléctrica constante igual a 1.8235.

Inicialmente se consideraron las opciones predeterminadas por CST: mesh step igual a 15, sin mallado local y PML igual a 1500 nm y se realizaron pruebas para distintos valores de tamaño del fondo (background). En la Fig. se observa así como el tiempo de cómputo de cada caso

Resultados

Make a short summary of the content of the thesis [**reyes2018analytical**, **pena-gomar2006coherent**, **barrera1991optical**, **garcia2012multiple**] and then your conclusions. Also explain your future steps on this project

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Conclusiones

 Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

 Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Apéndice A

Ajuste con el modelo de Lorentz

En la Sección 2.2 se empleó el modelo de osciladores de Lorentz para ajustar la parte imaginaria de la función dieléctrica mediante una superposición de N osciladores armónicos amortiguados, descrita por [35]

$$\varepsilon''(\omega) = \sum_{i=1}^N \frac{A_i \gamma_i \omega}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + \gamma_i^2 \omega^2}, \quad (\text{A.1})$$

donde A_i es la fuerza del oscilador asociada a la i -ésima transición electrónica, ω_{0i} es su frecuencia de resonancia y γ_i es el coeficiente fenomenológico de amortiguamiento [38]. Los conjuntos de parámetros para el ajuste se obtuvieron minimizando el error entre el modelo y los datos experimentales extraídos de la literatura.

En la Tabla A.1 se listan los parámetros ajustados para las tres concentraciones de hemoglobina consideradas y para el plasma. En todos los casos se ajustaron 6 osciladores. En los casos de la hemoglobina, en el espectro visible el oscilador centrado alrededor de $\hbar\omega_0 \approx 3$ eV (correspondiente a la banda de Soret, $\lambda \approx 413$ nm) presenta la mayor fuerza de oscilador, en concordancia con el hecho de que esta transición domina el espectro de absorción de la hemoglobina en ese rango [21]. Asimismo, se observa que la amplitud de dicha banda, así como la de las bandas Q en el visible, aumenta con la CHCM. Por otra parte, los parámetros muestran ligeros desplazamientos espectrales de las resonancias: en la concentración de 28.7 g/dL, las bandas α y β , asociadas a los osciladores con $\hbar\omega_0 = 2.16$ eV ($\lambda = 574$) y $\hbar\omega_0 = 2.29$ eV ($\lambda = 541$ nm), presentan un corrimiento hacia el rojo con respecto a los casos de 30.6 g/dL y 34.0 g/dL, mientras que las resonancias correspondientes a la banda de Soret y al oscilador en la región de $\hbar\omega_0 \approx 3.58$ – 3.59 eV ($\lambda \approx 345$ – 346 nm) muestran un desplazamiento hacia el azul. Los valores más altos de γ_i asociados a la banda de Soret indican que esta transición presenta un ensanchamiento y un amortiguamiento más pronunciados. Para todas las concentraciones, la banda α exhibe constantes de amortiguamiento menores que la banda β , lo que sugiere tiempos de vida efectivos más largos y resonancias más estrechas para la primera. De manera análoga, en el caso del plasma, los osciladores correspondientes a las resonancias alrededor de 1.27 eV ($\lambda \approx 976$ nm) y 2.37 eV ($\lambda \approx 523$ nm) presentan valores de γ_i inferiores a los de las otras transiciones, lo que se traduce en características espectrales más definidas y menos amortiguadas.

En la Fig. A.1 se presentan los datos experimentales (puntos rojos) de la parte imaginaria de la función dieléctrica de eritrocitos con CHCM de **a)** 28.7 g/dL, **b)** 30.6 g/dL y **c)** 34.0

A. AJUSTE CON EL MODELO DE LORENTZ

i	A_i [eV 2]	$\hbar\omega_i$ [eV]	$\hbar\gamma_i$ [eV]
CHCM: 28.7 g/dL			
1	4.87×10^{-4}	2.14	5.23×10^{-2}
2	8.28×10^{-4}	2.27	9.33×10^{-2}
3	1.8×10^{-2}	3.01	1.87×10^{-1}
4	8.47×10^{-3}	3.61	5.23×10^{-1}
5	1.84×10^{-2}	4.58	7.37×10^{-1}
6	2.66×10^{-5}	2.72	1.44×10^{-2}
CHCM: 30.6 g/dL			
1	9.67×10^{-4}	2.16	6.58×10^{-2}
2	1.43×10^{-3}	2.29	9.76×10^{-2}
3	2.83×10^{-2}	3	1.87×10^{-1}
4	1.45×10^{-2}	3.58	5.48×10^{-1}
5	3.61×10^{-2}	4.6	8.3×10^{-1}
6	1.02×10^{-5}	2.74	6.14×10^{-3}
CHCM: 34.0 g/dL			
1	1.15×10^{-3}	2.16	6.62×10^{-2}
2	1.47×10^{-3}	2.29	8.49×10^{-2}
3	3.2×10^{-2}	3	1.84×10^{-1}
4	1.59×10^{-2}	3.58	5.1×10^{-1}
5	4.05×10^{-2}	4.6	8.06×10^{-1}
6	9.13×10^{-8}	2.72	1.14×10^{-1}
Plasma			
1	8.75×10^{-7}	1.27	9.3×10^{-2}
2	1.24×10^{-5}	2.65	5.66×10^{-1}
3	2.71×10^{-6}	2.96	3.84×10^{-1}
4	2.18×10^{-4}	3.51	3.03×10^{-1}
5	2.25×10^{-4}	3.51	3.06×10^{-1}
6	4.65×10^{-6}	2.37	5.87×10^{-1}

Tabla A.1: Parámetros del modelo de Lorentz empleados para distintos valores de CHCM y para el plasma.

g/dL, extraídos de [17], [33] y [33], respectivamente, así como los correspondientes al d) plasma extraídos de [20]. En cada caso, la línea azul continua representa el ajuste obtenido mediante un modelo de osciladores de Lorentz, mostrado en función de la longitud de onda λ (eje inferior) y de la energía $\hbar\omega$ (eje superior). Las líneas grises verticales señalan las frecuencias de resonancia asociadas a los osciladores incluidos en el ajuste. Para las tres concentraciones de hemoglobina se distinguen en el rango visible la banda de Soret y las bandas Q.

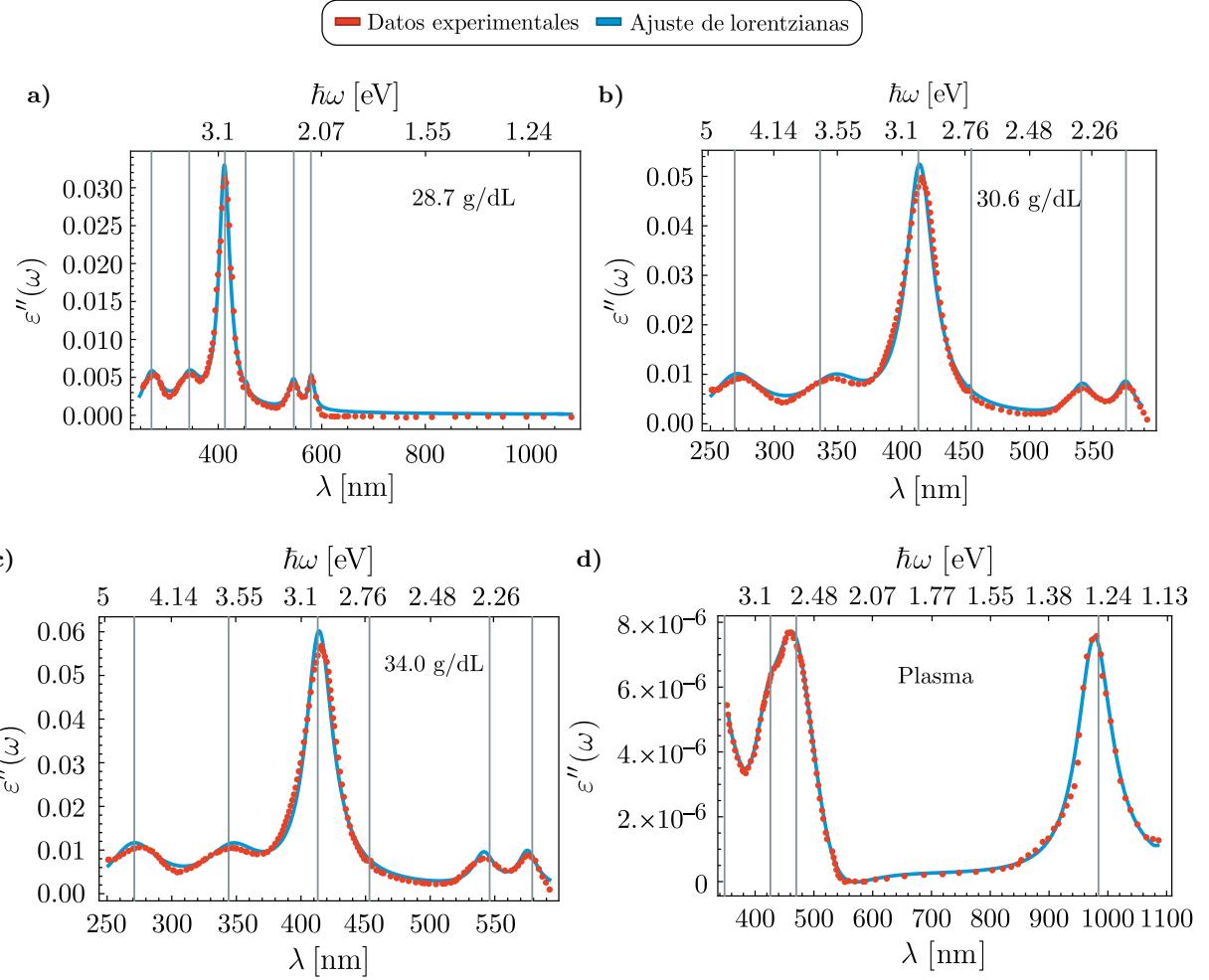


Fig. A.1: Parte imaginaria de la función dieléctrica como función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior). Se grafican datos experimentales representados por puntos rojos y el ajuste con lorentzianas con una línea azul continua para **a)** eritrocitos con una concentración de 28.7 g/dL , cuyos experimentales se obtuvieron de [17]; **b)** eritrocitos con una concentración de 230.6 g/dL , cuyos experimentales se obtuvieron de [33]; **c)** eritrocitos con una concentración de 34.0 g/dL , cuyos experimentales se obtuvieron de [33] y **d)** plasma, cuyos datos experimentales se extrajeron de [20]. En todas las figuras las líneas grises indican las frecuencias de resonancia asociadas a los osciladores de Lorentz empleados en el ajuste.

Apéndice B

Reconstrucción con SSKK

En la Sección 2.2 se reconstruyó la parte real de la función dieléctrica de los eritrocitos y del plasma mediante la aplicación de las relaciones SSKK. En esta sección se ilustra y discute dicha reconstrucción. En la Fig. B.1 se compara la parte real de la función dieléctrica obtenida a partir de SSKK (línea azul continua) con los datos experimentales correspondientes a CHCM de 28.7 g/dL y 30.6 g/dL (puntos rojos), observándose desviaciones promedio de 0.03 y 0.031, respectivamente. La línea continua que conecta los puntos experimentales se incluye únicamente como guía para el ojo. De manera análoga, en la Fig. B.2 se muestra la parte real de la función dieléctrica reconstruida mediante SSKK (línea azul continua) para una CHCM de 34.0 g/dL y para el plasma, junto con los datos experimentales (puntos rojos). En estos casos, las desviaciones promedio son del orden de 0.032 para los eritrocitos y de 0.015 para el plasma.

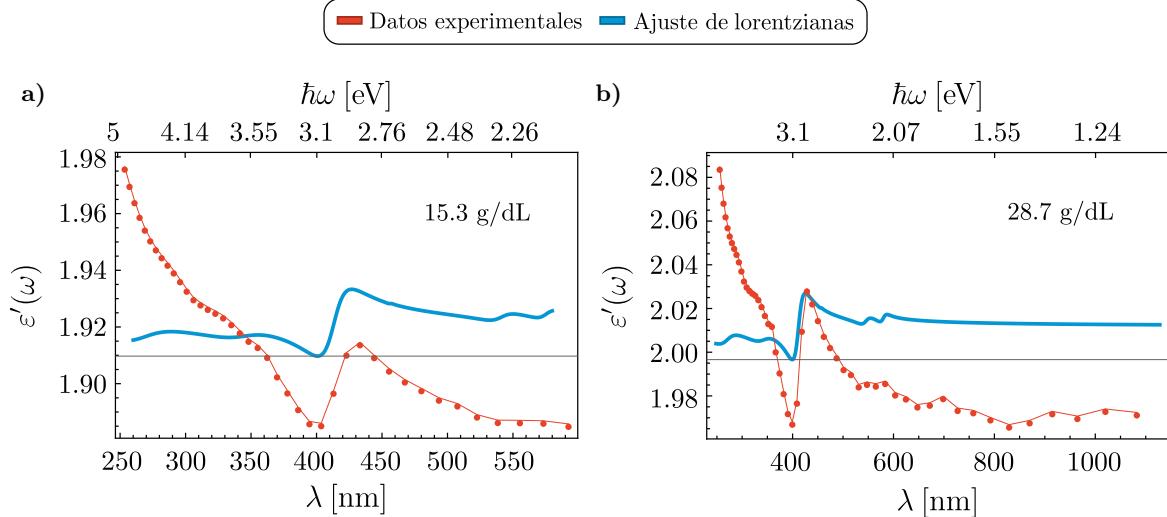


Fig. B.1: Parte imaginaria de la función dieléctrica como función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior). Se grafican datos experimentales representados por puntos rojos y el ajuste con lorenzianas con una línea azul continua para a) eritrocitos con una concentración de 15.3 g/dL, cuyos experimentales se obtuvieron de [33] y b) eritrocitos con una concentración de 28.7 g/dL, cuyos experimentales se obtuvieron de [17]. En ambas las figuras las líneas grises verticales indican las frecuencias de resonancia asociadas a los osciladores de Lorentz empleados en el ajuste.

Para comparar la reconstrucción obtenida mediante SSKK con la reconstrucción basada en KK reportada en [21], se aplicaron las relaciones SSKK a los datos de la parte imaginaria del

B. RECONSTRUCCIÓN CON SSKK

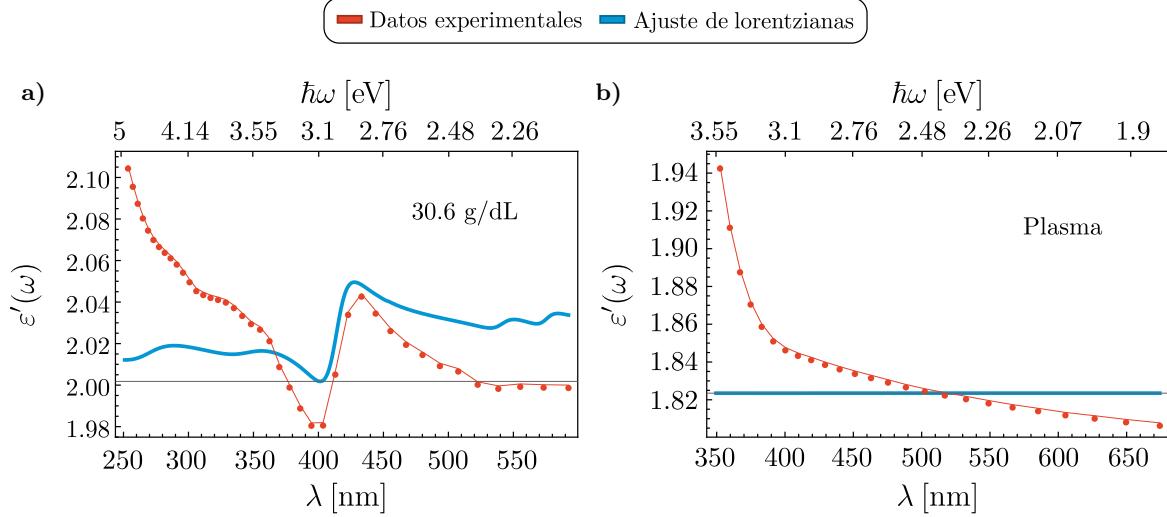


Fig. B.2: Parte imaginaria de la función dieléctrica como función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior). Se grafican datos experimentales representados por puntos rojos y el ajuste con lorentzianas con una línea azul continua para a) eritrocitos con una concentración de 30.6 g/dL, cuyos experimentales se obtuvieron de [33] y b) plasma, cuyos experimentales se obtuvieron de [20]. En ambas las figuras las líneas grises verticales indican las frecuencias de resonancia asociadas a los osciladores de Lorentz empleados en el ajuste.

índice de refracción correspondientes a una CHCM de 28.7 g/dL, extraídos de [33]. Como punto de anclaje se empleó el valor experimental de la parte real del índice de refracción a una energía de 2.98 eV, también reportado en [33]. En la Fig. B.3 se muestra la reconstrucción de la parte real del índice de refracción obtenida mediante SSKK (línea azul continua), junto con la reconstrucción obtenida mediante KK (línea azul oscuro continua) y los datos experimentales empleados para el punto de anclaje (puntos rojos). Se observa que el uso de SSKK no sólo asegura la coincidencia exacta en el punto de anclaje, sino que además reduce la desviación promedio respecto a los datos experimentales en todo el intervalo espectral considerado en aproximadamente un factor de tres, en comparación con la reconstrucción basada únicamente en KK.

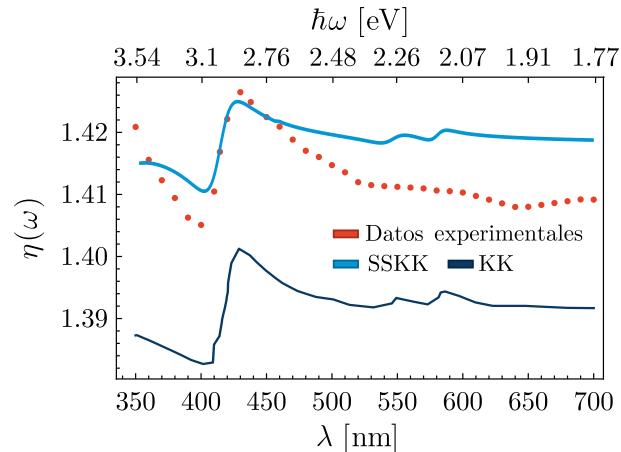


Fig. B.3: Parte real del índice de refracción de una CHCM de 28.7 g/dL en función de la longitud de onda λ (eje inferior) y la energía $\hbar\omega$ (eje superior). Se grafican con puntos rojos los datos experimentales extraídos de [33] que se emplearon para comparar la reconstrucción y las reconstrucciones obtenidas mediante SSKK (línea azul claro continua) y mediante KK (línea azul oscuro continua) obtenida de [21].

Bibliografía

- [1] C. F. Bohren y D. R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 2008 (citado en las págs. [3](#), [5-10](#), [12](#), [13](#)).
- [2] V. Lucarini, K.-E. Peiponen, J. Saarinen y E. Vartiainen. *Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research*. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2005 (citado en las págs. [3](#), [10](#), [14](#), [15](#), [23](#), [24](#)).
- [3] A. Zangwill. *Modern electrodynamics*. Cambridge University Press, 2013 (citado en las págs. [3](#), [6](#), [14](#)).
- [4] D. J. Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. Cambridge University Press, 2023 (citado en las págs. [3-6](#), [8](#), [28](#)).
- [5] J. D. Jackson. *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons, 2021 (citado en las págs. [4](#), [5](#), [10-13](#)).
- [6] D. A. Kirzhnits. General Properties of Electromagnetic Response Functions. En *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*. Volumen 24. Elsevier, 1989 (citado en la pág. [4](#)).
- [7] G. B. Arfken, H. J. Weber y F. E. Harris. *Mathematical methods for physicists: a comprehensive guide*. Academic press, 2011 (citado en las págs. [4](#), [5](#), [10-13](#)).
- [8] N. Subedi, P. Anderson y M. Berg. Measurement of the extinction cross section of a single wavelength-sized particle. En *Digital Holography and Three-Dimensional Imaging*, DTh4B-4. Optica Publishing Group, 2014 (citado en la pág. [10](#)).
- [9] S. A. Maier. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer US, 2007. DOI: [10.1007/0-387-37825-1](https://doi.org/10.1007/0-387-37825-1) (citado en la pág. [10](#)).
- [10] I. G. Roy. Hilbert Transform: A Brief Overview. *Resonance*, **29**(5):671-689, 2024 (citado en la pág. [10](#)).
- [11] S. H. Hall y H. L. Heck. *Advanced signal integrity for high-speed digital designs*. John Wiley & Sons, 2011 (citado en las págs. [13](#), [14](#)).
- [12] H. M. Nussenzveig. *Causality and dispersion relations*, volumen 95 de *Mathematics in Science and Engineering*. Academic Press, 1972 (citado en las págs. [14](#), [15](#)).
- [13] S. Nakov, E. Sobakinskaya y F. Müh. A unified framework for the numerical evaluation of the Q-subtractive Kramers-Kronig relations and application to the reconstruction of optical constants of quartz. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **288**:122157, 2023. DOI: [10.1016/j.saa.2022.122157](https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.122157) (citado en la pág. [14](#)).
- [14] G. W. Milton, D. J. Eyre y J. V. Mantese. Finite Frequency Range Kramers-Kronig Relations: Bounds on the Dispersion. *Physical Review Letters*, **79**(16):3062-3065, 1997. DOI: [10.1103/PhysRevLett.79.3062](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.3062) (citado en la pág. [14](#)).

BIBLIOGRAFÍA

- [15] R. Z. Bachrach y F. C. Brown. Exciton-Optical Properties of TlBr and TlCl. *Physical Review B*, **1**(2):818-831, 1970. doi: [10.1103/PhysRevB.1.818](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.1.818) (citado en la pág. 14).
- [16] E. Eremina, J. Hellmers, Y. Eremin y T. Wriedt. Different shape models for erythrocyte: Light scattering analysis based on the discrete sources method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **102**(1):3-10, 2006 (citado en las págs. 17, 20).
- [17] M. Friebel y M. Meinke. Model function to calculate the refractive index of native hemoglobin in the wavelength range of 250–1100 nm dependent on concentration. *Applied optics*, **45**(12):2838-2842, 2006 (citado en las págs. 17, 21, 22, 36, 37, 39).
- [18] M. Dayer, A. Moosavi-Movahedi y M. Dayer. Band Assignment in Hemoglobin Porphyrin Ring Spectrum: Using Four-Orbital Model of Gouterman. en. *Protein & Peptide Letters*, **17**(4):473-479, 2010. doi: [10.2174/092986610790963645](https://doi.org/10.2174/092986610790963645) (citado en las págs. 17, 25).
- [19] A. L. Mescher. *Junqueira's basic histology: text and atlas*. McGraw-Hill, 2024 (citado en la pág. 17).
- [20] M. Meinke, G. Müller, J. Helfmann y M. Friebel. Optical properties of platelets and blood plasma and their influence on the optical behavior of whole blood in the visible to near infrared wavelength range. *Journal of biomedical optics*, **12**(1):014024-014024, 2007 (citado en las págs. 17, 21-24, 36, 37, 40).
- [21] N. Bosschaart, G. J. Edelman, M. C. G. Aalders, T. G. Van Leeuwen y D. J. Faber. A literature review and novel theoretical approach on the optical properties of whole blood. *Lasers in Medical Science*, **29**(2):453-479, 2014. doi: [10.1007/s10103-013-1446-7](https://doi.org/10.1007/s10103-013-1446-7) (citado en las págs. 17-21, 23, 24, 35, 39, 40).
- [22] A. Sacco, D. Pajalunga, L. Latella, F. Siepi, A. Rufini y M. Crescenzi. Cell cycle reactivation in skeletal muscle and other terminally differentiated cells. *Kluwer Academic*:45-61, 2002 (citado en la pág. 18).
- [23] G. K. Pal. *Textbook of Medical Physiology*. Elsevier Health Sciences, 2021 (citado en la pág. 18).
- [24] S. Alummoottil, M. J. van Rooy, J. Bester, C. Grobbelaar y A. Phulukdaree. Scanning electron and atomic force microscopic analysis of erythrocytes in a cohort of atopic asthma patients—a pilot study. *Hemato*, **4**(1):90-99, 2023 (citado en la pág. 18).
- [25] Ergül, A. Arslan-Ergül y L. Gürel. Computational study of scattering from healthy and diseased red blood cells. *Journal of biomedical optics*, **15**(4):045004-045004, 2010 (citado en las págs. 19, 20).
- [26] E. M. Keohane, L. Smith y J. M. Walenga. *Rodak's hematology: clinical principles and applications*. Elsevier Health Sciences, 2015 (citado en las págs. 19, 21).
- [27] R. Saxena, S. Chamoli y M. Batra. Clinical evaluation of different types of anemia. *World Journal of Anemia*, **2**(1):26-30, 2018 (citado en las págs. 19, 20).
- [28] H. Donato, R. L. Crisp, M. C. Rapetti, E. García y M. Attie. Esferocitosis hereditaria: Revisión. Parte I. Historia, demografía, etiopatogenia y diagnóstico. *Arch. argent. pediatr*:69-80, 2015 (citado en la pág. 19).
- [29] R. Skalak, A. Tozeren, R. P. Zarda y S. Chien. Strain energy function of red blood cell membranes. *Biophysical journal*, **13**(3):245-264, 1973 (citado en la pág. 20).
- [30] J. Q. Lu, P. Yang y X.-H. Hu. Simulations of light scattering from a biconcave red blood cell using the finite-difference time-domain method. *Journal of Biomedical Optics*, **10**(2):024022-024022, 2005 (citado en la pág. 20).

BIBLIOGRAFÍA

- [31] Y. Fung, W. C. Tsang y P. Patitucci. High-resolution data on the geometry of red blood cells. *Biorheology*, **18**(3-6):369-385, 1981. A. Silberberg, edición. DOI: [10.3233/BIR-1981-183-606](https://doi.org/10.3233/BIR-1981-183-606) (citado en la pág. 20).
- [32] T. Wriedt, J. Hellmers, E. Eremina y R. Schuh. Light scattering by single erythrocyte: comparison of different methods. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **100**(1-3):444-456, 2006 (citado en la pág. 20).
- [33] M. Friebel y M. Meinke. Determination of the complex refractive index of highly concentrated hemoglobin solutions using transmittance and reflectance measurements. *Journal of Biomedical Optics*, **10**(6):064019-064019, 2005 (citado en las págs. 21-24, 36, 37, 39, 40).
- [34] S. Liu, Z. Deng, J. Li, J. Wang, N. Huang, R. Cui, Q. Zhang, J. Mei, W. Zhou y C. Zhang. Measurement of the refractive index of whole blood and its components for a continuous spectral region. *Journal of biomedical optics*, **24**(3):035003-035003, 2019 (citado en la pág. 22).
- [35] C. F. Bohren y D. R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 2008 (citado en las págs. 22, 35).
- [36] M. Maggiore. *A modern introduction to classical electrodynamics*. Oxford University Press, 2023. (Visitado 13-01-2026) (citado en la pág. 22).
- [37] K. F. Palmer, M. Z. Williams y B. A. Budde. Multiply subtractive Kramers–Kronig analysis of optical data. *Applied Optics*, **37**(13):2660-2673, 1998 (citado en la pág. 24).
- [38] U. Kreibig y M. Vollmer. *Optical properties of metal clusters*, volumen 25. Springer Science & Business Media, 2013 (citado en la pág. 35).