



TECNOLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO CAMPUS SAN MARTÍN TEXMELUCAN

DIVISIÓN DE INGENIERÍA EN SISTEMAS COMPUTACIONALES

**"ESTUDIO DE LA CONVERGENCIA NUMÉRICA DE LA
APROXIMACIÓN DE DIPOLO DISCRETO (DDA) PARA EL CÁLCULO
DE LAS EFICIENCIAS DE EXTINCIÓN DE NANOESFERAS DE SILICIO
POROSO"**

TESIS

**PARA OBTENER EL GRADO DE:
LICENCIADA EN INGENIERÍA EN SISTEMAS
COMPUTACIONALES**

PRESENTA:
LUCERO DE LA ROSA DE LA ROSA
14240014

ASESOR:
M.C. ARTURO SANTOS GÓMEZ

SAN MARTÍN TEXMELUCAN, PUEBLA., A 10 MAYO DE 2024.

RESUMEN

En la actualidad, el Silicio Poroso (SiP) ha cobrado importancia en el desarrollo de aplicaciones en la fotónica y opto-electrónica, como por ejemplo en sensores, celdas solares, almacenamiento de energía, entre otras. Por lo tanto, es fundamental investigar la respuesta óptica de estos materiales para avanzar en el desarrollo de tecnologías basadas en ellos.

El problema de obtener las propiedades ópticas de manera experimental radican en el costo elevado y en una amplia gama de experimentos que imposibilitan obtener los resultados de manera inmediata. Por lo que es crucial obtener la respuesta óptica de estos materiales utilizando simulación computacional.

En esta tesis de investigación, estamos enfocados en estudiar la convergencia de la Aproximación de Dipolo Discreto (DDA), implementado en el código DDSCAT (Discrete Dipole Approximation Scattering Tool), en el cálculo de las eficiencias ópticas de nanoesferas de SiP.

Los tamaños considerados de las nanoesferas son de 50, 100 y 200 nm, y las fracciones de porosidad consideradas son de 0.25, 0.50 y 0.75. El índice de refracción fue calculado con el modelo de Bruggeman utilizando resultados experimentales de Green (**green2008self**). Los resultados fueron comparados con los obtenidos por medio de la Teoría de Mie, la cual es la solución exacta del problema de la dispersión de la luz con una nanoesfera.

Para avanzar en el entendimiento y aplicación de las propiedades ópticas de las nanoestructuras de Silicio Poroso, con el fin de mejorar el diseño y la eficiencia de dispositivos electrónicos en la micro y nanoscalada.

ABSTRACT

Currently, Porous Silicon (PSi) has become important in the development of applications in photonics and optoelectronics, such as sensors, solar cells, energy storage, among others. Therefore, it is crucial to investigate the optical response of these materials to advance in the development of technologies based on them.

The problem of obtaining optical properties experimentally lies in the high cost and a wide range of experiments that make it impossible to obtain results immediately. Hence, obtaining the optical response of these materials using computational simulation is crucial.

In this research thesis, we are focused on studying the convergence of the Discrete Dipole Approximation (DDA) implemented in the DDSCAT code (Discrete Dipole Approximation Scattering Tool) in calculating the optical efficiencies of PS nanospheres.

The sizes considered for the nanospheres are 50, 100, and 200 nm, and the porosity fractions considered are 0.25, 0.50, and 0.75. The refractive index was calculated using the Bruggeman model using experimental results from Green ([green2008self](#)). The results were compared with those obtained through Mie Theory, which is the exact solution to the problem of light scattering with a nanosphere.g
Porous Silicon nanostructures.

Agradecimientos

De manera muy personal he de admitir que me resulta difícil expresar mis sentimientos, especialmente cuando sé que serán leídos por personas que probablemente no conozco. Sin embargo, quiero tomarme un momento para dejar este recordatorio. Anotar nombres se vuelve complicado, ya que no quiero excluir a ninguna persona que haya sido parte de este largo camino.

En primer lugar, agradezco a mi asesor, M.C. Arturo Santos Gómez, que ahora forma parte del cuerpo académico de la carrera de Ingeniería Ambiental, por su guía experta, paciencia y dedicación a lo largo de todo el proceso. Sus valiosas sugerencias y comentarios fueron fundamentales para dar forma y mejorar este trabajo, por ayudarme a caminar cuando estaba en el laberinto de los, quizás, gracias por pensar en los estudiantes, gracias por dedicarse a la docencia, es un buen humano, una gran persona y un excelente profesor.

Agradezco a mis profesores de la carrera de Ing. en Sistemas Computacionales por compartir sus conocimientos y brindarme la oportunidad de explorar áreas de interés.

Quiero reconocer el apoyo del cuerpo académico de la carrera de Ingeniería Ambiental, donde tuve la oportunidad de colaborar con colegas talentosos. La experiencia en este entorno de investigación fue invaluable y contribuyó significativamente a la calidad de este trabajo.

Agradezco a mis amigos y familia por su constante aliento y comprensión durante este desafiante proceso. Su apoyo emocional ha sido un pilar fundamental.

Finalmente, agradezco a mi padre, el mejor del mundo mundial, por el respaldo brindado en todas las formas posibles, recuerdo un momento de frustración y duda existencial, me sentía sin ánimos, y apenada por no cumplir expectativas, ese día en el que platicando al respecto, me miro a los ojos y me dijo que no había presión, que todo a su tiempo, me recalco lo importante y especial que soy y lo mucho que iba a lograr, me abrazo y calmo mis miedos, penas y tristezas, yo podía con eso y más, la realidad es que palabras de aliento había muchas, pero que super papá lo dijera, tenía esa paz que calmaba mi espíritu y alebrestaba a mi corazón para impulsar mis ganas y entonces mucho tomo sentido, papi gracias por todo y por más, eres tan gigante y algún día deseo ser tan grande como tú. Miss, gracias por la fiel compañía en cada paso, por las pláticas extensas, por cada bache, por ajustar el carburador cuando hace falta y tener paciencia en el ensamble, ya sabes, todos necesitamos afinación de vez en cuando.

Cada una de estas personas ha dejado una huella imborrable en este trabajo, y estoy sinceramente agradecida por su contribución a mi crecimiento académico y personal.

Titlakamej in tlalticpac, nochi pampa masehualmeh, nochi pampa mocuepaz in teopixcatzinco, in motlanequilizco ayamo inic cuecayo, in motlanequilizco nimitzintiliz. In totonemiliz, in teotl tlacachi-pahaultic in macehualmeh intla, in niyolmeh nemi xochitl in tlalticpac, in intla mociuix in ipan xoxouhqui, nochi zan omomachtia nochi quetzalnamictia in tlalticpac intla motlalnamictia. In tiyaquilemiliya niyaz in tlalticpac, niquetzalnamictiz, nicniuhtzintliz nemi in tlamantli, in tocihuintli, in tlatlatzontli. In chihuaniya zan quetzalnamictia in tlalticpac, in xopantli, in itonal. Nochi zan nimitzintiliz, nochi zan niquintiliz; niquilnamictiz in tlalticpac, itech monequi nochi chocanemi. Atech monequi, zan nimitzintiliz, nochi zan niquintiliz, itech monequi. Titlamatiliz in tlalticpac, itech quetzalnamictiz.

Índice general

CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN	1
1.1 Introducción	2
1.2 Antecedentes	3
1.3 Problema de Investigación	7
1.4 Justificación	7
1.5 Propósito del Estudio	8
1.6 Objetivos del Estudio	9
1.6.1 Objetivo General	9
1.6.2 Objetivos Específicos	9
1.7 Preguntas de Investigación	9
1.8 Planteamiento de Hipótesis	10
CAPÍTULO II MARCO CONCEPTUAL	11
2.1 Conceptos Teóricos de la Física	12
2.1.1 Campo Eléctrico	12
2.1.2 Ecuaciones de Maxwell	13
2.1.3 Espectro Electromagnético	14
2.1.4 Onda Electromagnética Plana	15
2.1.5 Propiedades de la Luz	15
2.2 Espectroscopia	17
2.2.1 Espectroscopia UV-Vis	17
2.2.2 Espectroscopia NIR	18
2.2.3 Espectrometría Raman	18
CAPÍTULO III MÉTODOS PARA EL CÁLCULO DE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS DE PARTÍCULAS AISLADAS	20

3.1	Propiedades Ópticas de Partículas Aisladas	21
3.2	Teoría de Mie	23
3.3	Método de la Aproximación de Dipolo Discreto	24
CAPÍTULO IV HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES		28
4.1	Herramientas Computacionales	29
4.1.1	Sistemas Operativos	29
4.1.2	Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, Supercomputadora Cuetlaxcoapan	30
4.1.3	SLURM	33
4.1.4	MobaXterm	34
4.1.5	Matlab	35
4.1.6	Overleaf	35
4.2	Herramientas para el Cálculo de Propiedades Ópticas	36
4.2.1	MiePlot	36
4.2.2	DDSCAT	37
CAPÍTULO V SILICIO Y SILICIO POROSO		42
5.1	Silicio	43
5.2	Silicio Poroso	43
5.3	Indice de refracción del Silicio Poroso: Modelo de Bruggeman	44
5.3.1	Implementación del Modelo de Bruggeman en Matlab	45
CAPÍTULO VI EFICIENCIAS ÓPTICAS DE NANOESFERAS DE SiP USANDO LA TEORÍA DE MIE		48
6.1	Eficiencias Ópticas de Nanoesferas de SiP Usando la Teoría de Mie	49
6.2	Ánalisis de Resultados	51
CAPÍTULO VII ESTUDIO DE LA CONVERGENCIA NUMÉRICA DE NANOESFERAS DE SILICIO POROSO CON EL ALGORITMO DE DDA		53
7.1	Construcción de nanoesferas en función del número de dipolos.	54
7.2	Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP utilizando DDSCAT en función de la discretización y de la fracción de porosidad	55
7.2.1	Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP de 50 nm de diámetro	55

7.2.2	Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP de 100 nm de diámetro	56
7.2.3	Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP con 200 nm de diámetro	57
7.2.4	Análisis de resultados	58
7.3	Error Cuadrático Medio de las eficiencias de extinción obtenidas con DDSCAT	58
7.3.1	ECM de nanoesferas de diámetro de 50 nm	58
7.3.2	ECM de nanoesferas de diámetro de 100 nm	60
7.3.3	ECM de nanoesferas de diámetro de 200 nm	61
7.3.4	Análisis de resultados	62
7.4	Estudio de convergencia para tres longitudes de onda de prueba	62
7.4.1	Convergencia de nanoesferas de diámetro de 50 nm	62
7.4.2	Convergencia de nanoesferas de diámetro de 100 nm	64
7.4.3	Convergencia de nanoesferas de diámetro de 200 nm	65
7.4.4	Análisis de resultados	67
CAPÍTULO VIII CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES Y APORTACIÓN		68
8.1	Conclusiones	69
8.2	Recomendaciones	70
8.3	Aportación	70
Glosario		71
BIBLIOGRAFÍA		71

Lista de tablas

2.1	Unidades de las cantidades físicas usuales para describir los fenómenos electromagnéticos.	13
2.2	Ecuaciones de Maxwell.	14
4.3	Comandos básicos de gestión de ficheros y directorios en linux.	31
7.4	Relación entre SHPAR y el número de dipolos para la construcción de una nanoesfera.	54
7.5	ECM de las eficiencias de extinción en nanoesferas con diámetro de 50 nm.	59
7.6	ECM de las eficiencias de extinción en nanoesferas con diámetro de 100 nm.	60
7.7	ECM de las eficiencias de extinción en nanoesferas con diámetro de 200 nm.	61
7.8	Valores numéricos del estudio de convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 50 nm, para tres longitudes de onda de prueba.	63
7.9	Valores numéricos del estudio de convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 100 nm, para tres longitudes de onda de prueba.	64
7.10	Valores numéricos del estudio de convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 200 nm, para tres longitudes de onda de prueba.	66

Índice de figuras

1.1	Error en la eficiencia de extinción para distintas geometrías usando DDA.	4
1.2	Comparación del elemento S_{11} de la matriz de dispersión de una esfera dieléctrica calculada con ADDA y con Teoría de Mie.	4
1.3	Eficiencias ópticas de una esfera de Plata de 100 nm de diámetro calculadas con DDA, BEM y la solución analítica de Mie.	5
1.4	Eficiencias de extinción y factor de realce del campo cercano de nanoesferas de Oro de 50 nm de diámetro.	6
2.1	Fuerza eléctrica entre dos cargas.	12
2.2	Campo Eléctrico \vec{E} , Que Siente Una Carga Q_0 Debida A Una Carga Q	13
2.3	Espectro electromagnético.	14
2.4	Onda electromagnética plana simple.	15
2.5	Reflexión y refracción de la luz en una interfaz.	16
2.6	Espectroscopía.	18
2.7	Espectrofotómetro Scienovo modelo LT-UVIS-752	18
2.8	Analizador multipropósito FT-NIR.	19
2.9	Espectrometría Raman.	19
3.10	Efecto en la luz por una colección de partículas.	21
3.11	Esfera imaginaria que encierra a una partícula aislada.	22
3.12	Esfera siendo irradiada por una onda electromagnética plana.	23
3.13	Objetivo discretizado por una red cúbica de momentos dipolares.	24
4.14	Etapas en la conexión al LNS.	32
4.15	Interfaz de MobaXTerm	34
4.16	Interfaz de MATLAB	35
4.17	Interfaz de la plataforma Overleaf	35
4.18	LATEX	36

4.19 MiePlot	37
4.20 DDSCAT 7.3	37
5.21 Elemento químico Silicio.	43
5.22 Colores iridiscentes en la naturaleza.	44
5.23 Índice de refracción del Silicio Poroso obtenido con el modelo de Bruggeman.	47
6.24 Eficiencias ópticas de nanoesferas de SiP con $P = 0.25$	49
6.25 Eficiencias ópticas de nanoesferas de SiP con $P = 0.50$	50
6.26 Eficiencias ópticas de nanoesferas de SiP con $P = 0.75$	51
7.27 Construcción de nanoesferas en función del número de dipolos.	54
7.28 Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP con $D=50\text{ nm}$ en función de la discretización y de la fracción de porosidad.	55
7.29 Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP con $D=100\text{ nm}$ en función de la discretización y de la fracción de porosidad.	56
7.30 Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP con $D=200\text{ nm}$ en función de la discretización y de la fracción de porosidad.	57
7.31 Gráficas del error cuadrático medio de las nanoesferas de diámetro de 50 nm.	59
7.32 Gráficas del error cuadrático medio de las nanoesferas de diámetro de 100 nm.	60
7.33 Gráficas del error cuadrático medio de las nanoesferas de diámetro de 200 nm.	61
7.34 Convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 50 nm, para tres longitudes de onda de prueba.	64
7.35 Convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 100 nm, para tres longitudes de onda de prueba.	65
7.36 Convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 200 nm, para tres longitudes de onda de prueba.	66

PARTICIPACIÓN ACADÉMICA

■ PUBLICACIONES

1. **De La Rosa-De La Rosa Lucero**, Ramírez-Zúñiga Andrea C, Santos-Gómez Arturo, *Estudio Teórico De Las Eficiencias Ópticas De Nanoesferas De Silicio Poroso*. Revista 100CIA TEC. Año 16, Edición No. 32. ISSN 2007- 5669. Año 2022.
2. **Lucero De La Rosa**, Arturo Santos-Gómez, Jacinto Sandoval-Lira, Ivan Rafael Sánchez Juárez, *Estudio de la convergencia numérica de las propiedades ópticas de nanoesferas de Silicio Poroso*. Revista “Experiencias Científicas, Tecnológicas y de Innovación (ECTI) del ITSVA”, con registro ISSN: 2954-3746. Diciembre de 2023.

■ PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

1. **De La Rosa De La Rosa Lucero**, Santos-Gómez Arturo. *Estudio de la convergencia numérica de las propiedades ópticas de nanoesferas de Silicio Poroso*. 1er Congreso Estatal de Ciencia e Ingeniería de Materiales, organizado por el Capítulo Estudiantil de la Sociedad Mexicana de Materiales en la BUAP. Abril, 2022.
2. Arturo Santos-Gómez, Josué Ramírez-Hernández, Andrea Citlalin Ramírez-Zúñiga, **Lucero De-La-Rosa**, Jacinto Sandoval-Lira. *Theoretical characterization of the optical properties of a sensor based on Kretschmann geometry and a Porous Silicon photonic crystal*. XV International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, organizado por la Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales. Puerto Vallarta, 26-29 de septiembre del 2022.

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN

1.1. Introducción

El Silicio poroso (SiP) es el material principal en la industria de los semiconductores y la electrónica (**Concepto**), el conocimiento de sus propiedades ópticas es esencial para el diseño y desarrollo de dispositivos y circuitos integrados cada vez más pequeños y rápidos, por lo tanto, es esencial comprender como el material interactúa con la luz, tanto para la investigación fundamental como para el desarrollo de dispositivos.

Estudiar las propiedades ópticas del Silicio (Si) con fracciones de porosidad es importante por varias razones: La porosidad controlada en el Si puede modificar sus propiedades de absorción y emisión de luz (**de2006porous**), lo que es esencial para diseñar sensores de alta sensibilidad para aplicaciones como la detección de gases, la detección de biomoléculas y la espectroscopia en intervalo Ultra Violeta y Visible. Además, esta propiedad puede aumentar la eficiencia de la captación de luz solar y reducir la reflexión de la luz en la superficie, lo que puede conducir a una mejor conversión de energía solar en electricidad.

Por otra parte, la construcción de estos compuestos nanoestructurados requiere de mucha infraestructura, por lo que una de las alternativas que guía a los experimentos es el modelado mediante simulaciones computacionales. Teniendo esto en mente, la presente tesis se encuentra dividida en los siguientes capítulos: en el capítulo 1, se presenta un contexto general del tema de estudio; en el capítulo 2, se hace una revisión de literatura para identificar teorías relevantes y conceptos clave del estudio; en el capítulo 3, abordamos la metodología utilizada para calcular las propiedades de interés; en el capítulo 4 se muestran las herramientas que se utilizaron para el desarrollo de este trabajo; en el capítulo 5 se aborda el material de estudio “Silicio” en su forma pura y “Silicio poroso”; en el capítulo 6 se muestran los resultados de las eficiencias ópticas de nanoesferas de SiP usando la teoría de Mie haciendo uso de gráficos para representar los datos; en el capítulo 7, se visualizan los resultados del estudio de la convergencia numérica de nanoesferas de silicio poroso con el algoritmo de DDA; y en el capítulo 8 se exponen los hallazgos clave y se da la sugerión de direcciones para futuras investigaciones.

1.2. Antecedentes

De acuerdo con Rivera y col. (**rivera2002estudio**), el Silicio es el material más utilizado en la fabricación de dispositivos electrónicos por sus propiedades fisicoquímicas, su abundancia en la corteza terrestre, el bajo costo y fácil procesamiento para fabricar circuitos integrados. Por otra parte, la obtención de SiP de alta fotoluminiscencia a temperatura ambiente y la comprobación de la electroluminiscencia de este material han generado una gran actividad en la investigación encaminada a explicar el origen de la fotoluminiscencia y producir material poroso de alta calidad para la fabricación de dispositivos optoelectrónicos.

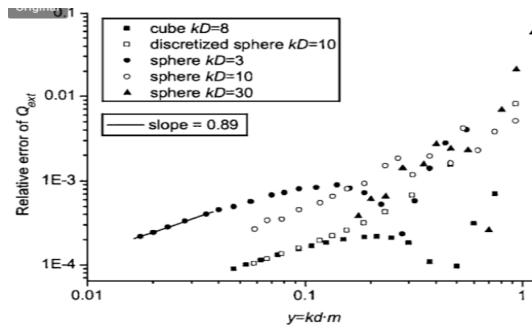
Esta tendencia resalta la importancia de continuar explorando las características únicas del Silicio, no solo en aplicaciones electrónicas tradicionales, sino también en el desarrollo de tecnologías avanzadas que aprovechen sus propiedades ópticas, considerando otros métodos y análisis teóricos relevantes en la investigación de materiales y su comportamiento bajo diversas condiciones, por lo tanto, en lo siguiente se presentan algunos trabajos de investigación relacionados con el estudio de convergencia numérica de propiedades ópticas de nanopartículas.

En la publicación titulada “Convergence of the discrete dipole approximation. I. Theoretical analysis” (**yurkin2006convergence**), se lleva a cabo un análisis teórico de la convergencia usando la Aproximación de Dipolo Discreto (DDA) para resolver la dispersión de luz en partículas de formas arbitrarias, utilizando un número constante de dipolos. Un resultado importante de su estudio se presenta en la Figura 1.1, en la cual estiman el error en la eficiencia de extinción, para un cubo y para esferas con parámetros definidos en el recuadro de la figura, en función del parámetro $y = kd/m$, donde $k = 2\pi/\lambda$ es el número de onda, d es la distancia entre dipolos y m es el índice de refracción del objeto. Este resultado muestra que el error en la eficiencia de extinción depende del número de dipolos relacionado con la variable, d así como de la longitud de onda, relacionada a través de k , y del tamaño del objeto definido con la variable D .

En el artículo “The discrete-dipole-approximation code ADDA: Capabilities and known limitations”, los autores Maxim A. Yurkin y Alfons G. Hoekstra (**yurkin2011discrete**), realizaron estudios de convergencia del método de DDA utilizando su implementación llamada Advanced Discrete Dipole Approximation, por sus siglas en inglés (ADDA). Uno de los resultados que presentan, es la comparación del elemento S_{11} de la matriz de dispersión calculada con el método de ADDA y con la Teoría de Mie en las direcciones cercanas hacia adelante y hacia atrás para una esfera con un parámetro de tamaño $x=320$ y un índice de refracción $m=1.05$, utilizando 1024 dipolos por diámetro de la esfera. La

Figura 1.1

Error en la eficiencia de extinción para distintas geometrías usando DDA.

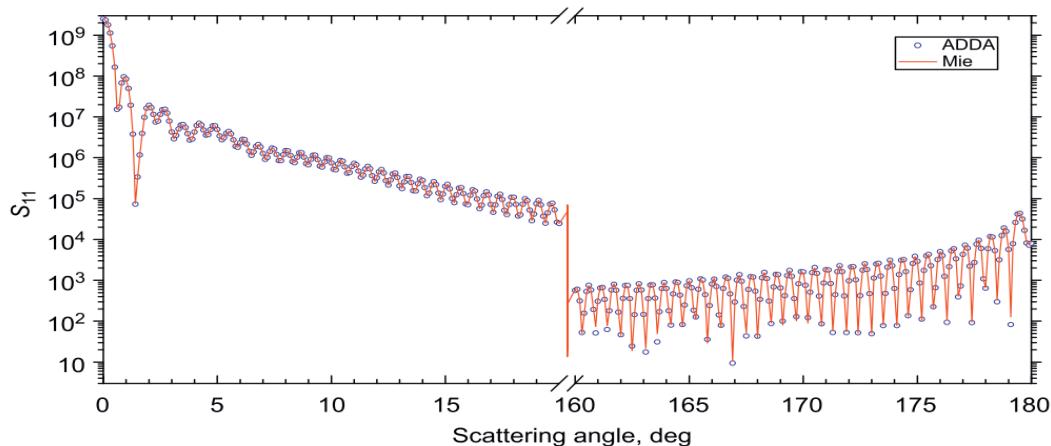


Nota. Tomada de ([yurkin2006convergence](#)).

comparación de S_{11} se muestra en la Figura 1.2. Se puede apreciar la concordancia entre los valores calculados con ADDA y con la Teoría de Mie.

Figura 1.2

Comparación del elemento S_{11} de la matriz de dispersión de una esfera dieléctrica calculada con ADDA y con Teoría de Mie.



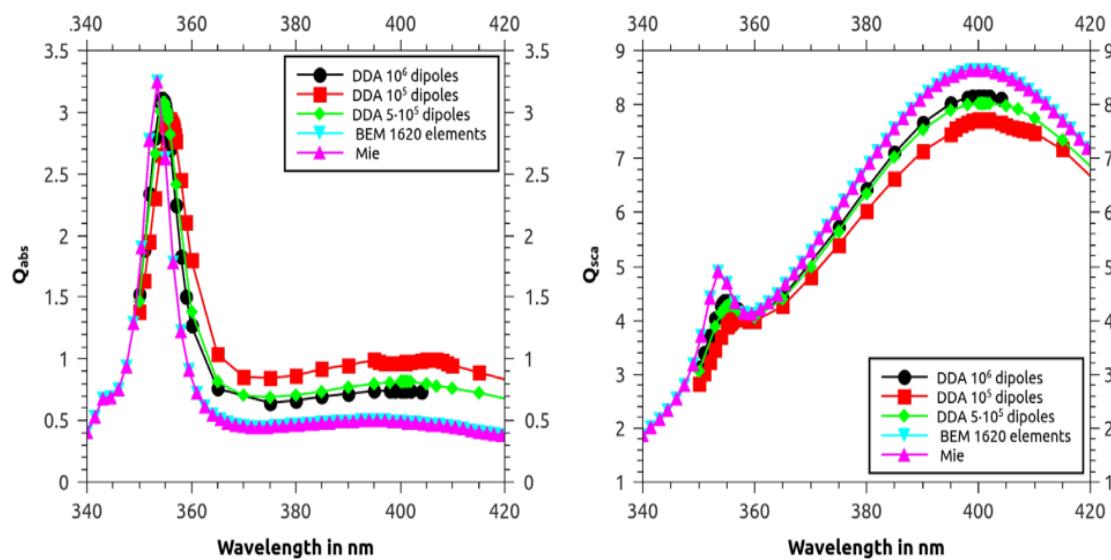
Nota. Tomada de ([yurkin2011discrete](#)).

En el artículo titulado “On the applicability of discrete dipole approximation for plasmonic particles” ([vartia2016applicability](#)), los autores calcularon las eficiencias de dispersión y absorción para diversas partículas y densidades de discretización. Se centraron especialmente en determinar las ubicaciones de los picos de absorción y dispersión plasmónica. Este análisis se llevó a cabo utilizando el modelo

ADDA, el método de elementos de frontera, como acrónimo en inglés (BEM) y la Teoría de Mie. En la figura 1.3 se presenta la comparación de la eficiencia de absorción (Q_{abs}) y dispersión (Q_{sca}) para una esfera de plata con diámetro igual a 100 nm. Se observa en la ubicación del pico de resonancia dipolar, en la longitud de onda $\lambda = 400$ nm, los valores calculados con DDA se aproximan a los obtenidos con la Teoría de Mie al aumentar la densidad en la discretización.

Figura 1.3

Eficiencias ópticas de una esfera de Plata de 100 nm de diámetro calculadas con DDA, BEM y la solución analítica de Mie.



Nota. Tomada de ([vartia2016applicability](#)).

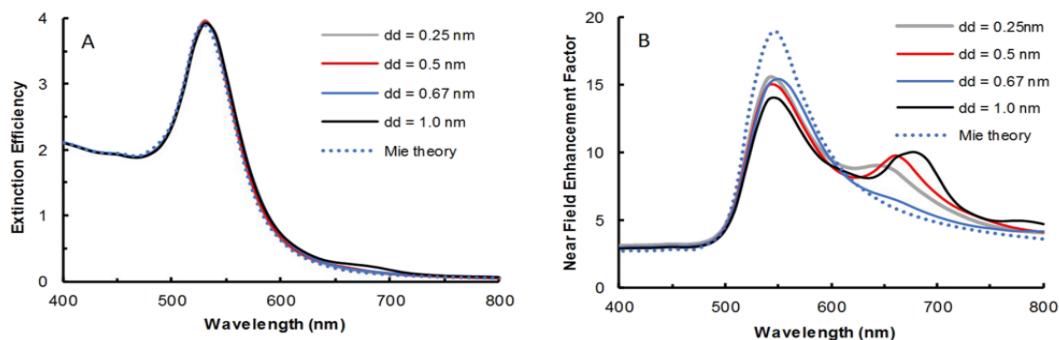
En la publicación titulada “Assessing the uncertainties of the discrete dipole approximation in case of melting ice particles” ([ori2018assessing](#)), los autores estudiaron la aplicabilidad de la Aproximación Discreta de Dipolos, para la dispersión por copos de nieve, comprobando la precisión de DDA en el caso de una esfera de hielo a varios tamaños de partículas, espesores, frecuencias y resoluciones de la discretización de DDA. Visualizando que la sección transversal de retro dispersión y absorción mostraba los mayores sesgos en comparación con la referencia de Mie. La precisión de DDA parece disminuir especialmente cuando se utilizan pocos dipolos para representar algún elemento estructural del objetivo con un alto índice de refracción. Los resultados de DDA en general convergen hacia la solución exacta de Mie cuando los errores de forma y discretización se reducen.

Los autores del artículo titulado “Near-field and far-field optical properties of magnetic plasmonic

core-shell nanoparticles with non-spherical shapes: A discrete dipole approximation study” buscan la utilización de núcleos magnéticos, para aplicaciones como la separación magnética, la resonancia magnética y la administración magnética de medicamentos. Estos núcleos se estabilizan químicamente mediante la cobertura con metales nobles, como el oro (Au), que no solo proporciona una superficie químicamente inerte, sino que también introduce propiedades plasmónicas interesantes para aplicaciones en detección, imagen y terapia fototérmica (**bhardwaj2019near**). En este trabajo, se destaca el uso de DDA para calcular propiedades espectrales de nanopartículas núcleo-cáscara FeO-Au con formas no esféricas, centrándose en núcleos de Óxido de Hierro (Fe_3O_4) de 35 nm de diferentes formas y con espesores de cáscara de Oro variables. El objetivo es probar la aplicabilidad de la DDA para calcular el aumento del campo cercano y examinar el impacto de la forma del núcleo en las propiedades plasmónicas de las nanopartículas núcleo-cáscara, los resultados obtenidos se comparan con los resultados exactos de la Teoría de Mie. La Figura 1.4 (A) presenta los espectros de extinción calculados por DDA de nanopartículas de Oro de 50 nm en función de la distancia de dipolo (0.25 nm, 0.5 nm, 0.75 nm y 1 nm). En tanto, la Figura 1.4 (B) muestra los resultados correspondientes para los espectros promedio del factor de mejora del campo cercano.

Figura 1.4

Eficiencias de extinción y factor de realce del campo cercano de nanoesferas de Oro de 50 nm de diámetro.



Nota. Tomada de (**bhardwaj2019near**).

1.3. Problema de Investigación

En la actualidad, una de las nuevas aplicaciones de la nanotecnología y nanofotónica es la detección de sustancias a bajas concentraciones, incluso de un número pequeño de moléculas (**raman2014identificacion**). Dos técnicas que se han utilizado en los últimos años son la tecnología TERS y SERS, que por sus siglas en inglés son Espectroscopías Raman mejoradas por Punta y Substrato, respectivamente, las cuales utilizan el realce del campo electromagnético cercano a la muestra para incrementar la respuesta Raman. Estas tecnologías han usado metales para la fabricación de las puntas y los substratos, pero poco se ha evaluado el uso de materiales no metálicos.

Por otra parte, un material que ha sido utilizado para el desarrollo de microcircuitos, ha sido el Silicio. Recientemente, la síntesis de Silicio poroso ha originado interés por las diversas aplicaciones de este material en áreas como la biomedicina y óptica, debido a su gran capacidad de absorción, así como sus interesantes propiedades ópticas, como indica (**lasave2010desarrollo**).

Aunado a lo anterior, pruebas experimentales de nuevos materiales, requieren de laboratorios y equipos especializados, lo que resulta costoso llevar a cabo estos experimentos. En este contexto, la caracterización de las propiedades ópticas de estructuras complejas de sistemas nanoestructurados por medio de simulación computacional juega un papel importante en el área de investigación.

El uso de herramientas computacionales para el cálculo de propiedades físicas, requiere un grado de precisión para obtener respuestas confiables, por lo que es importante realizar estudios de convergencia numérica.

Por lo anterior, en tesis, se presenta un estudio metodológico de la convergencia numérica de la Aproximación de Dipolo Discreto (DDA), que permite calcular las propiedades ópticas de sistemas nanoestructurados. La convergencia numérica estará enfocada en las eficiencias ópticas de extinción de nanoesferas de Silicio, tomando en consideración tanto su tamaño, y fracción de porosidad. Los resultados obtenidos se comparan con la solución exacta de la Teoría de Mie, con el propósito de identificar los parámetros de discretización idóneos para futuras simulaciones de mayor complejidad. Esto se hace necesario para asegurar la confiabilidad y validez de los resultados obtenidos.

1.4. Justificación

El reciente auge de las tecnologías experimentales en la fabricación de dispositivos micro y nanoestructurados basados en SiP ha generado interés significativo en la comunidad científica

([li2015lab](#)), dando lugar a la abundancia de estudios tanto teóricos como experimentales. Un ejemplo destacado de la aplicación del SiP en avances tecnológicos se encuentra en su empleo en la creación de sensores ópticos. Este material se utiliza como absorbente de contaminantes químicos o moléculas de relevancia, particularmente en el campo de la salud ([moretta2021porous](#)). Estos sensores se basan principalmente en sistemas nanoestructurados unidimensionales y poco se sabe de aplicaciones con nanopartículas esféricas de SiP.

En este contexto, el presente trabajo de investigación aporta conocimientos para la comprensión de las propiedades ópticas de sistemas de nanopartículas esféricas de SiP, aunque en el caso de nanopartículas esféricas existe una solución exacta ([bohren2008absorption](#)), para sistemas más complejos, como agregados de nanopartículas o sistemas periódicos, no existe una solución exacta, es por ello que se requiere el uso de aproximaciones numéricas para la solución del problema de la dispersión de luz por nanoesferas.

La finalidad de esta tesis es determinar los valores óptimos que permitan agilizar el cálculo de las propiedades ópticas de manera efectiva y eficiente, evaluando su desempeño antes de su implementación práctica. Los resultados obtenidos ampliarán la comprensión de las propiedades ópticas de este material y su potencial uso en diversos ámbitos científicos y tecnológicos.

1.5. Propósito del Estudio

El propósito de esta tesis es realizar un estudio metodológico de la precisión en las propiedades ópticas de las nanoesferas de SiP en función del tamaño de la nanoesfera, el porcentaje de porosidad y el número de puntos utilizado en la discretización de la geometría.

El presente estudio tendrá un impacto significativo en la mejora de la precisión de las propiedades ópticas de las nanoesferas de SiP, lo que es esencial para avanzar en la comprensión y aplicación de estas nanoestructuras en diversas aplicaciones científicas y tecnológicas. Además, se busca establecer una metodología eficiente y confiable que servirá como base para futuras investigaciones en el campo de las nanoestructuras ópticas.

1.6. Objetivos del Estudio

1.6.1. Objetivo General

Estudiar la convergencia numérica de la aproximación de dipolo discreto (DDA) para el cálculo de las propiedades ópticas de campo lejano de nanoesferas de Silicio poroso en función del número de puntos en la discretización de la geometría.

1.6.2. Objetivos Específicos

1. Estudiar e implementar el modelo de Bruggeman en MATLAB para el cálculo del índice de refracción del Silicio poroso.
2. Calcular las propiedades ópticas de campo lejano de nanoesferas de Silicio poroso, usando el método de la Teoría de Mie, mediante el programa Mie Plot.
3. Estudiar la convergencia numérica de la Aproximación de Dipolo Discreto en las propiedades de campo lejano de nanoesferas de Silicio poroso y comparar con la solución exacta obtenida con la Teoría de Mie.

1.7. Preguntas de Investigación

A partir del auge del desarrollo experimental en la síntesis de nanoestructuras, se ha confirmado que la respuesta óptica de estas nanoestructuras puede ser modulada a través de la variación de características físicas, tales como tamaño, forma e incluso porosidad (**gonzalez2007influence; estrada2018**). Esta capacidad de modificar las propiedades ópticas se ha convertido en un recurso valioso para diversas aplicaciones (**ijazz2020detail**).

En este trabajo, la pregunta central que guía la investigación se enfoca en entender cómo el aumento del número de puntos en la discretización del objeto puede mejorar la precisión del cálculo de las propiedades ópticas de las nanoesferas de SiP. Para abordar esta cuestión, se llevará a cabo un estudio teórico utilizando tanto la solución precisa ofrecida por la Teoría de Mie como el método DDA. La elección del método DDA se justifica por su capacidad para adaptarse a morfologías no esféricas, lo que amplía significativamente su aplicabilidad en este contexto.

Con lo anterior, la pregunta de investigación es la siguiente: ¿Cómo influye la fracción de porosidad en las propiedades ópticas de las nanoesferas de SiP y cuál es el impacto de la discretización

en el cálculo de las eficiencias ópticas con el método de DDA?

1.8. Planteamiento de Hipótesis

El presente estudio se enfoca en la evaluación de la precisión del método DDA en el cálculo de las propiedades ópticas de nanopartículas esféricas de SiP en función del número de puntos utilizados para la discretización del objeto. El conocer el número óptimo de puntos en la discretización requeridos para modelar la geometría de una nanoesfera de SiP, puede maximizar la precisión de las simulaciones de propiedades ópticas en nanoestructuras de SiP.

Investigaciones previas han evidenciado que un aumento en el número de dipolos conlleva una disminución en el error de la aproximación de DDA respecto a la solución exacta. Este fenómeno se anticipa igualmente en este estudio exploratorio.

Finalmente, la autora considera que, con la realización de este proyecto, el conocimiento generado pueda utilizarse en el campo de la simulación numérica de las propiedades ópticas nanoesféricas de Silicio poroso. Además, estos resultados podrán ser contrastados con los hallazgos obtenidos en investigaciones experimentales.

CAPÍTULO II

MARCO CONCEPTUAL

2.1. Conceptos Teóricos de la Física

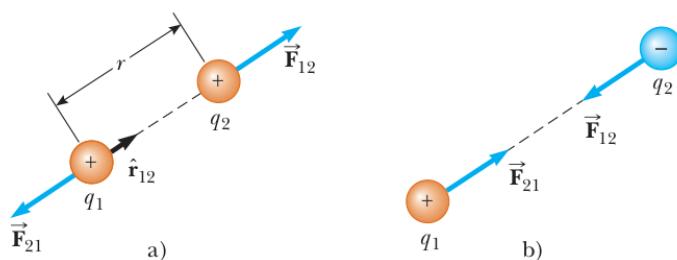
En el siguiente segmento se realiza la introducción a temas como el campo eléctrico, con la finalidad de entender el comportamiento de las cargas eléctricas, enunciando y describiendo leyes de Maxwell, además se aborda el concepto de espectro electromagnético, y las propiedades de la luz. En la última parte se describen algunas metodologías experimentales como la espectroscopía Uv-Vis para la descripción óptica-física de la materia.

2.1.1. Campo Eléctrico

Un concepto fundamental en la teoría electromagnética es el campo eléctrico. Este concepto se refiere a la acción de las fuerzas de campo que operan a través del espacio, produciendo efectos incluso en ausencia de contacto físico entre los objetos que interactúan. La fuerza eléctrica resulta en la atracción o repulsión de objetos con carga, como se ilustra en la Figura 2.1.

Figura 2.1

Fuerza eléctrica entre dos cargas.

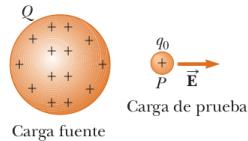


Nota. a) Cuando las cargas tienen el mismo signo, la fuerza se repele. b) Cuando las cargas tienen signos opuestos, se atraen. Adaptado de *Física para ciencias e ingeniería con física moderna* (p.37) por Serway & Jewett ([serway2009fisica](#)).

Serway y Jewett en ([serway2009fisica](#)), indican que, en este planteamiento, existe un campo eléctrico en la región del espacio que rodea a un objeto con carga: denominado, carga fuente. Cuando otro objeto con carga —la carga de prueba— entra en este campo eléctrico, una fuerza eléctrica actúa sobre él. Para ejemplificar, observe la Figura 2.2.

Figura 2.2

Campo Eléctrico \vec{E} , Que Siente Una Carga Q_0 Debida A Una Carga Q .



Nota. Un cuerpo cargado crea un campo eléctrico en el espacio que lo rodea.

El campo eléctrico provocado por la carga fuente en la carga de prueba se define como la fuerza eléctrica sobre la carga de prueba *por carga unitaria*, o, para mayor claridad, el vector \vec{E} del campo eléctrico en un punto en el espacio se define como la fuerza eléctrica \vec{F}_e que actúa sobre una carga de prueba positiva q_0 colocada en ese punto, dividida entre la carga de prueba; como se puede visualizar en la Fórmula 2.1

$$\vec{E} \equiv \frac{\vec{F}_e}{q_0}. \quad (2.1)$$

2.1.2. Ecuaciones de Maxwell

A continuación, las unidades de las cantidades físicas se presentan en la Tabla 2.1(**serway2009física**).

Y las cuatro ecuaciones se pueden observar en la Tabla 2.2

Tabla 2.1

Unidades de las cantidades físicas usuales para describir los fenómenos electromagnéticos.

Vector	Descripción
\vec{E}	Vector de intensidad de campo eléctrico.
\vec{D}	Vector del desplazamiento eléctrico.
\vec{B}	Vector de inducción magnética.
\vec{H}	Vector de campo magnético.
\vec{J}	Vector de densidad de corriente.
ρ_{libre}	Densidad volumétrica de carga libre.
I_{conduc}	Corriente de conducción.

Nota. Las explicaciones y predicciones se basan en magnitudes físicas cuya descripción matemáticas son campos vectoriales dependientes de la posición en el espacio y el tiempo.

Ley de Gauss del campo magnético: Afirma que el flujo magnético en una superficie cerrada=0.

Ley de Gauss: Indica que el flujo eléctrico total a través de cualquier superficie cerrada es igual

a la carga neta dentro de dicha superficie.

Ley de Faraday: Describe la creación de un campo eléctrico por un flujo magnético cambiante.

Ley Ampère-Maxwell: Describe la creación de un campo magnético por un campo eléctrico cambiante y por corriente eléctrica.

Tabla 2.2

Ecuaciones de Maxwell.

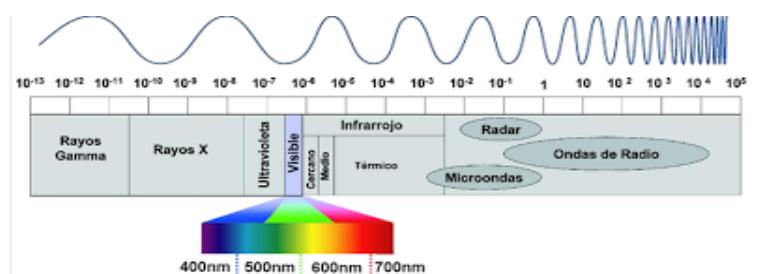
LEY	DIFERENCIAL	INTEGRAL
Ley de Gauss para el campo magnético	$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$	$\iint_s \vec{B} \cdot d\vec{A} = 0$
Ley de Gauss	$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{libre}$	$\iint_s \vec{D} \cdot d\vec{A} = Q$
Ley de Faraday	$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$	$\oint_{c(s)} \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\frac{d}{dt} \iint_s \vec{B} \cdot d\vec{A}$
Ley de Ampére-Maxwell	$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$	$\oint_{c(s)} \vec{H} \cdot d\vec{l} = I_{conduc} + \frac{d}{dt} \iint_s \vec{D} \cdot d\vec{A}$

2.1.3. Espectro Electromagnético

Según ([sears1986fisica](#)) las ondas electromagnéticas cubren un espectro extremadamente amplio de longitudes de onda y frecuencia. En la Figura 2.3, se presenta el intervalo del espectro electromagnético más común, en él se indican los intervalos de longitud de onda y frecuencia aproximados de sus diferentes segmentos. El intervalo de la luz visible con longitud de onda de 400 a 700 nm, y la radiación ultravioleta con longitud de onda más corta que la radiación visible, con intervalo espectral de valores equivalentes a 280 nm como valor inicial y 400 nm (límite con el espectro visible).

Figura 2.3

Espectro electromagnético.

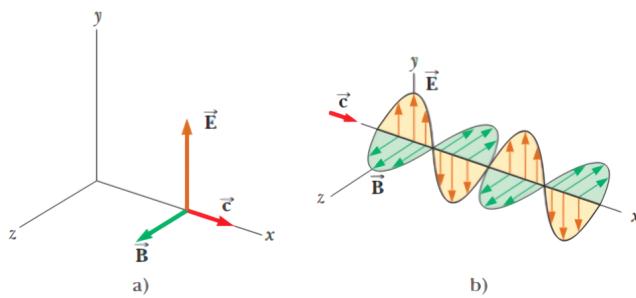


2.1.4. Onda Electromagnética Plana

De acuerdo con (**serway2009física**), los vectores para el campo eléctrico y el campo magnético en una onda electromagnética tienen un comportamiento espacio-tiempo específico, simple y consistente con las ecuaciones de Maxwell. En el caso de una onda electromagnética que viaja en la dirección “ x ” *dirección de propagación*, el campo eléctrico \vec{E} apunta en la dirección “ y ” y el campo magnético \vec{B} en la dirección “ z ”, como se ilustra en la Figura 2.4a. Tales ondas, en que los campos eléctrico y magnético se restringen a ser paralelos a un par de ejes perpendiculares, se denominan como ondas linealmente polarizadas. Las magnitudes de campo E y B dependen únicamente de “ x ” y “ t ”, en la Figura 2.4b se muestra una onda electromagnética sinusoidal.

Figura 2.4

Onda electromagnética plana simple.



Nota. a) Representación de los campos eléctrico \vec{E} y magnético \vec{B} de una onda electromagnética que viaja con velocidad c en la dirección “ x ” positiva en un instante de tiempo. b) Representación de una onda electromagnética sinusoidal que se mueve en la dirección “ x ” positiva con una rapidez c .

2.1.5. Propiedades de la Luz

En las siguientes subsecciones se abordarán conceptos clave que son fundamentales en óptica. Estos incluyen la reflexión de la luz, la refracción, el índice de refracción, la extinción de la luz, así como la dispersión y absorción de la misma, para comprender cómo interactúa la luz con los materiales y cómo se aplican estos principios en el estudio que aquí se presenta.

Reflexión y Refracción

La reflexión es el fenómeno que ocurre cuando una onda (como la luz, el sonido, etc.) incide sobre una superficie y rebota en dirección opuesta, sin cambiar el medio por el cual se propaga. Es el

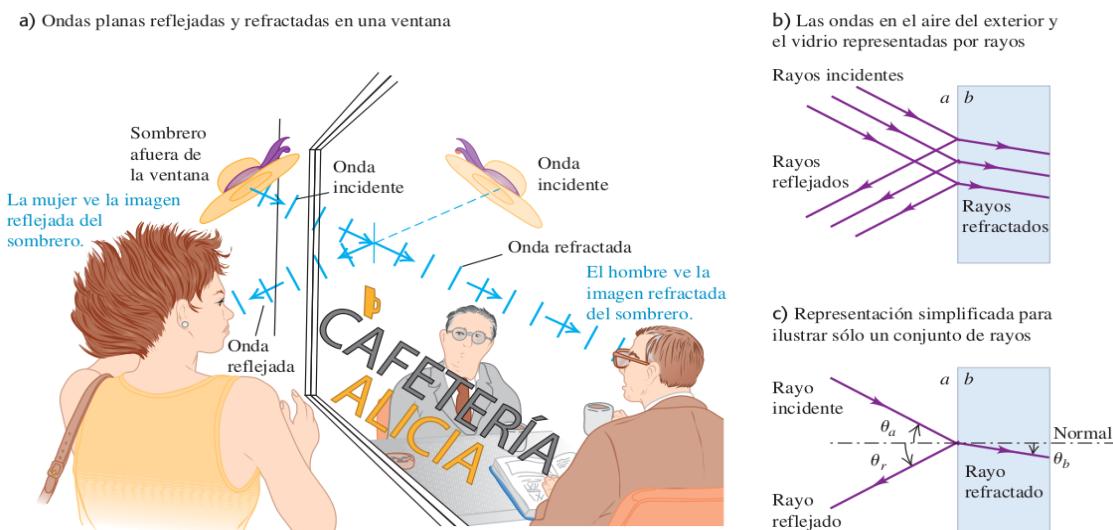
fenómeno fundamental para el funcionamiento de espejos y la formación de imágenes en superficies reflectantes.

La refracción es el cambio de dirección que experimenta una onda al pasar de un medio a otro con diferente densidad, lo que también provoca un cambio en la velocidad de la onda, proceso esencial en la formación de arcoíris y otros fenómenos ópticos naturales. Ambos fenómenos son esenciales para entender y manipular las ondas en diversas aplicaciones científicas y tecnológicas.

Como se ilustra en la Figura 2.5 cuando una onda luminosa incide en una interfaz lisa que separa dos materiales transparentes (como el aire y el vidrio o el agua y el vidrio), la onda en general es *reflejada* parcialmente y también *refractada* (transmitida) parcialmente hacia el segundo material. Por ejemplo, cuando se mira a través de la ventana de un restaurante desde la calle, observa una reflexión de la escena en la calle, pero una persona en el interior del restaurante puede ver a través de la ventana la misma escena conforme la luz la alcanza por refracción (**sears1986física**).

Figura 2.5

Reflexión y refracción de la luz en una interfaz.



Nota. a) Una onda plana es en parte reflejada y en parte refractada en la frontera entre dos medios (aire y vidrio). La luz que alcanza el interior es refractada dos veces, una cuando entra al vidrio y otra al salir de este. b) y c) ¿Cómo se comporta la luz en la interfaz entre el aire (material a) y el vidrio (material b)? Para el caso que se ilustra, el material b tiene un índice de refracción mayor que el del material a ($n_b > n_a$) y el ángulo θ_b es más pequeño que θ_a . Tomado de (**sears1986física**).

El índice de refracción es una medida crucial que describe cómo la luz se propaga a través del material. Conocer el índice de refracción es importante por varias razones, ya que permite el análisis y diagnóstico mediante técnicas como la espectroscopía, para identificar sustancias y analizar sus

propiedades químicas, además que contribuye en la investigación y desarrollo de nuevos materiales, conocer el índice de refracción ayuda a comprender sus propiedades ópticas y potenciales aplicaciones. En la nanotecnología y fotónica, permite diseñar dispositivos a escala nanométrica con propiedades ópticas específicas, aportando en la calidad y control en la fabricación industrial.

Índice de Refracción

La rapidez de la luz en cualquier material es menor que en el vacío. Es conveniente definir el índice de refracción, n , el índice de refracción de un material, se define de la siguiente manera:

$$n \equiv \frac{\text{rapidez de la luz en el vacío}}{\text{rapidez de la luz en un medio}} \equiv \frac{c}{v}, \quad (2.2)$$

El índice de refracción es un número sin dimensiones mayor que la unidad porque, v , (rapidez de la luz en un medio) siempre es menor que, c , (rapidez de la luz en el vacío). Además, n , es igual a la unidad para el vacío. En general, el índice de refracción es un número complejo y es dependiente de la longitud de onda con la cual se ilumina el material.

2.2. Espectroscopia

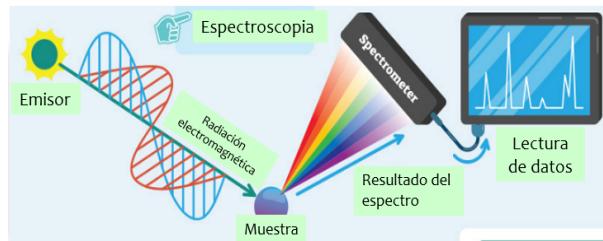
La espectroscopia es una técnica que se utiliza para estudiar la interacción entre la luz y la materia, ver Figura 2.6, utilizan un espectrómetro para medir la cantidad de radiación electromagnética absorbida o emitida por una muestra en diferentes longitudes de onda o energías, para obtener información sobre la composición química, la estructura molecular, propiedades físicas y otras características de la muestra. Existen varios tipos de espectroscopia, cada uno con diferentes tipos de interacción entre la luz y la muestra. Algunas de ellas son: UV-Vis, infrarrojo (IR) y Raman.

2.2.1. Espectroscopia UV-Vis

Los espectrofotómetros son los equipos utilizados para medir la luz en los espectros UV/VIS (ultravioleta-visible). Utilizan un sensor o fotodiodo para medir una banda específica de luz, y se agregan filtros al sensor para bloquear longitudes de onda no deseadas. Los sensores se calibran en la intensidad pico deseada y miden toda la luz debajo de la curva para generar una única lectura. En la Figura 2.7 se muestra un espectrofotómetro comercial UV-VIS.

Figura 2.6

Espectroscopía.



Nota. La radiación electromagnética de un rango de longitud de onda, pasa desde una fuente a través de una muestra, lo que resulta en absorción o emisión de la luz por la muestra (**PASCO**).

Figura 2.7

Espectrofotómetro Scienovo modelo LT-UVIS-752 .



Nota. Tomado de (**PASCO**).

2.2.2. Espectroscopia NIR

La espectroscopía de infrarrojo cercano (NIR) utiliza una fuente de luz halógena para producir longitudes de onda de infrarrojo cercano. La espectroscopía NIR generalmente requiere un espectrómetro de alta resolución para garantizar datos precisos. La mayoría utilizan algoritmos de software y métodos estadísticos para interpretar cada frecuencia, que se expresan en forma de gráfico, cada pico representa la vibración de un grupo funcional, y el tamaño del pico corresponde a la cantidad de compuesto químico presente. En la Figura 2.8 se presenta un espectrómetro infrarrojo comercial.

2.2.3. Espectrometría Raman

La espectroscopía Raman es complementaria a la espectroscopía infrarroja. Ambas tecnologías miden cambios en las vibraciones y rotaciones moleculares, la espectroscopía infrarroja mide la cantidad de luz IR absorbida y la espectroscopía Raman mide la cantidad de luz dispersada (**PASCO**). La técnica de espectrometría Raman proporciona información detallada sobre la fase y el polimorfismo de una

Figura 2.8

Analizador multipropósito FT-NIR.

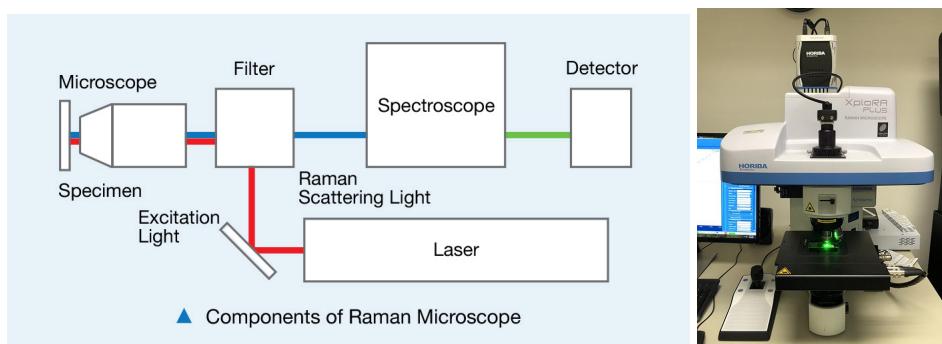


Nota. Tomado de (**PASCO**).

muestra, la cristalinidad e interacciones moleculares, y la estructura química. Se basa en la técnica de dispersión de luz Raman, en la que una molécula dispersa la luz incidente de una fuente de luz láser de alta intensidad. La mayor parte de la luz dispersada tendrá la misma longitud de onda que la fuente de luz y, por lo tanto, no será relevante. Un porcentaje muy pequeño de luz se dispersa en diferentes longitudes de onda que la fuente, lo que produce una dispersión Raman.

Figura 2.9

Espectrometría Raman.



Nota. (a)Componentes de un Microscopio Raman. (b)Microscopio Horiba MTB. XPlora (**PASCO**).

CAPÍTULO III

MÉTODOS PARA EL CÁLCULO DE LAS

PROPIEDADES ÓPTICAS DE PARTÍCULAS

AISLADAS

Como se discutió en el capítulo anterior, la espectroscopia es un método fundamental para obtener experimentalmente la respuesta óptica de la materia. Sin embargo, en ocasiones puede resultar difícil acceder al equipo necesario para llevar a cabo experimentos espectroscópicos. Por esta razón, en este capítulo se presentan métodos teóricos que permiten obtener la respuesta óptica de la materia de manera computacional, sin la necesidad de equipos experimentales sofisticados.

En lugar de depender exclusivamente de mediciones experimentales, estos métodos teóricos utilizan modelos matemáticos y cálculos computacionales para predecir y analizar el comportamiento óptico de los materiales. Esto no solo ofrece una alternativa viable cuando el acceso al equipo experimental es limitado, sino que también proporciona una comprensión más profunda de los fundamentos físicos subyacentes de las interacciones entre la luz y la materia.

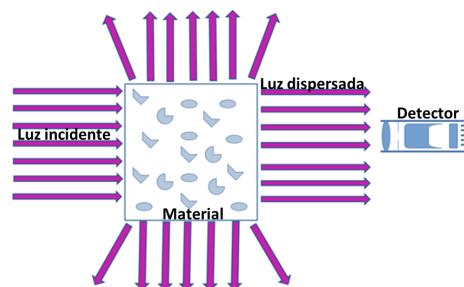
Como se discutió en el capítulo anterior, las espectroscopías son técnicas esenciales para obtener experimentalmente la respuesta óptica de la materia. Sin embargo, el acceso a este tipo de equipos puede ser limitado. Por esta razón, en este capítulo se presentan métodos teóricos para determinar la respuesta óptica de la materia

3.1. Propiedades Ópticas de Partículas Aisladas

Las propiedades ópticas importantes para un objeto aislado son la absorción, la dispersión y la extinción, ver Figura 3.10, la extinción de la luz en un objeto aislado depende de la composición química de la partícula, su tamaño, forma, orientación, medio circundante, número de partículas y estado de polarización/frecuencia del haz incidente.

Figura 3.10

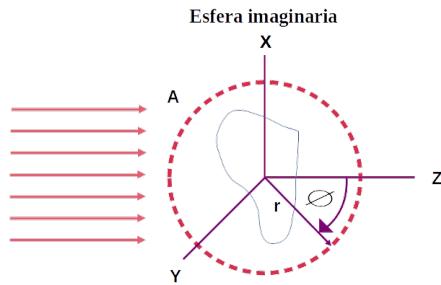
Efecto en la luz por una colección de partículas.



Para obtener estas propiedades ópticas, se construye una esfera imaginaria de radio r alrededor

Figura 3.11

Esfera imaginaria que encierra a una partícula aislada.



de la partícula, (ver Figura 3.11). La energía electromagnética que es absorbida por unidad de tiempo está dada por,

$$W_{abs} = - \int_A \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r dA. \quad (3.3)$$

donde \mathbf{S} es el vector de Poynting, por Bohren & Huffman **bohren2008absorption**. Considerando que el medio donde se encuentra la partícula no es absorbente, W_{abs} queda expresada como la suma de tres términos,

$$W_{abs} = W_{inc} - W_{dis} + W_{ext}, \quad (3.4)$$

donde W_{inc} , que es la energía de la radiación por unidad de tiempo que incide en la partícula, se anula al realizar la integral de superficie cerrada en A , por lo que W_{ext} será la suma de la energía absorbida por unidad de tiempo con la energía dispersada W_{dis} :

$$W_{ext} = W_{abs} + W_{dis}. \quad (3.5)$$

Dividiendo la última expresión con el producto de la irradiancia incidente¹ y el área transversal de la partícula, se obtienen las eficiencias ópticas² de extinción, absorción y dispersión, relacionadas con la siguiente ecuación:

$$Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{dis}. \quad (3.6)$$

¹La irradiancia es el promedio temporal del vector de Poynting.

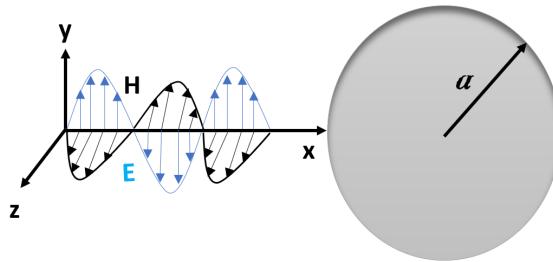
²Que se caracterizan con el factor Q porque es una medida que representa la calidad de un sistema óptico.

3.2. Teoría de Mie

La teoría de Mie, también conocida como solución de Mie, es una teoría que describe la dispersión de ondas electromagnéticas, como la luz, por partículas esféricas de tamaño comparable a la longitud de onda de la luz incidente. Fue desarrollada por el físico alemán Gustav Mie en 1908 ([quinten2010optical](#)).

Figura 3.12

Esfera siendo irradiada por una onda electromagnética plana.



Los campos incidentes, esparcidos, y al interior de la esfera, deben escribirse como una suma de armónicos vectoriales esféricos, junto con las condiciones de contorno, se puede llegar a expresiones para los campos al interior de la esfera y los campos dispersados. Una vez conocidos los campos y utilizando el vector de Poynting, \mathbf{S} , es posible calcular la energía extinguida por la esfera, así como la energía dispersada, por medio de la siguiente expresión,

$$W_{\text{dis}} = \int_A \mathbf{S}_{\text{dis}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r da, \quad y \quad W_{\text{ext}} = - \int_A \mathbf{S}_{\text{ext}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r da, \quad (3.7)$$

donde la integral de superficie cerrada, encierra a la esfera. Las eficiencias ópticas de extinción, Q_{ext} , y dispersión, Q_{dis} , se pueden obtener fácilmente de las expresiones 3.7, haciendo el cociente con la intensidad de la radiación incidente y el área de la sección transversal de la partícula. Las expresiones son las siguientes,

$$Q_{\text{ext}} = \frac{W_{\text{ext}}}{AI_i} = \frac{2\pi}{Ak^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}\{a_n + b_n\}, \quad (3.8)$$

$$Q_{\text{dis}} = \frac{W_{\text{dis}}}{AI_i} = \frac{2\pi}{Ak^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2), \quad (3.9)$$

donde los coeficientes a_n y b_n están dados por,

$$a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx)[xj_n(x)]' - \mu_1 j_n(x)[mxj_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x)[mxj_n(mx)]'}, \quad (3.10)$$

$$b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx)[xj_n(x)]' - \mu j_n(x)[mxj_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x)[mxj_n(mx)]'}, \quad (3.11)$$

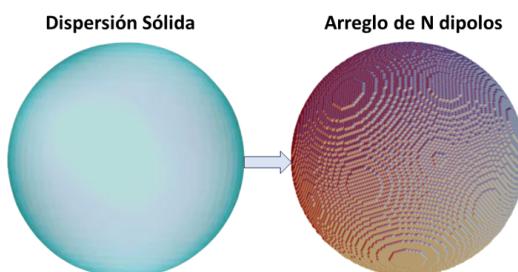
siendo $m = N_1/N$, donde N_1 y N es el índice de refracción de la esfera y del medio que la contiene, respectivamente; μ_1 y μ son la permeabilidad magnética de la partícula y el medio; j_n las funciones esféricas de Bessel; $h_n^{(1)}$ las funciones de Hankel; y el parámetro de tamaño se define como $x = 2\pi N/\lambda$.

3.3. Método de la Aproximación de Dipolo Discreto

La teoría DDA fue introducida por primera vez por Purcell y Pennypacker (**purcell1973scattering**) y ha sido objeto de numerosas mejoras, en particular las desarrolladas por Draine *et al.* (**draine1994discrete**; **gutkowicz2004propagation**); también se ha aplicado a una amplia gama de problemas, incluyendo polvo interestelar, cristales de hielo en la atmósfera, polvo interplanetario, células sanguíneas humanas, semiconductores, nanopartículas metálicas, cúmulos y sistemas periódicos (**draine1988discrete**; **Yurkin2005**; **gonzalez2007influence**; **draine2008discrete**). La Aproximación de Dipolo Discreto se ha utilizado desde hace algunas décadas para determinar las propiedades ópticas de objetivos individuales, ver Figura 3.13. En particular, ha sido útil para investigar la posición y el número de las resonancias de plasmón de superficie de nanopartículas de metales nobles de diferentes tamaños, materiales y formas (**gonzalez2007influence**; **Gonzalez2014**).

Figura 3.13

Objetivo discretizado por una red cúbica de momentos dipolares.



La técnica DDA consiste en representar el material del objetivo mediante un número finito de entidades polarizables, o dipolos, considerando que la distancia entre ellos es menor que la longitud de onda de la radiación externa. Cada dipolo se coloca en una red cúbica simple, a partir de $j = 1, \dots, N$; siendo j el índice del sitio de la red, y podemos asociar un tensor de polarizabilidad, a cada uno de ellos por medio de la siguiente expresión,

$$\mathbf{p}_i = \overset{\leftrightarrow}{\alpha}_i \cdot \mathbf{E}_{\text{loc},i}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (3.12)$$

donde \mathbf{p}_i y α_i es el momento dipolar y el tensor de polarizabilidad, respectivamente. $\mathbf{E}_{\text{loc},i}$ es el campo local compuesto por la superposición del campo incidente y $\mathbf{E}_{\text{inc},i}$ el campo producido por los otros dipolos en la estructura. $N - 1$ dipolos, $\mathbf{E}_{\text{ind},i}$, i.e.,

$$\mathbf{E}_{\text{loc},i} = \mathbf{E}_{\text{inc},i} + \mathbf{E}_{\text{ind},i}, \quad (3.13)$$

con

$$\mathbf{E}_{\text{inc},i} = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i - i\omega t), \quad \mathbf{E}_{\text{ind},i} = - \sum_{j=1}^N' \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}_{ij} \cdot \mathbf{p}_j. \quad (3.14)$$

La suma se extiende desde 1 a N y la prima denota la suma que evita la contribución del dipolo en el punto que estamos calculando el campo local por lo tanto, el producto $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}_{ij} \cdot \mathbf{p}_j$ es,

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}_{ij} \cdot \mathbf{p}_j = \frac{e^{ikr_{ij}}}{r_{ij}^3} \left\{ k^2 \mathbf{r}_{ij} \times (\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_j) + \frac{(1 - ikr_{ij})}{r_{ij}^2} [r_{ij}^2 \mathbf{p}_j - 3\mathbf{r}_{ij}(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{p}_j)] \right\}, \quad (3.15)$$

donde $k = \omega/c$ es la magnitud del vector de onda incidente, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ y $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$. Cada elemento de la matriz $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}$ es un 3×3 matriz y definiendo $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}_{jj} = 0$, es posible escribir (3.12) como un conjunto de N ecuaciones vectoriales complejas simultáneas, como,

$$\mathbf{p}_i = \overset{\leftrightarrow}{\alpha}_i \cdot \left(\mathbf{E}_{\text{inc},i} - \sum_{j=1}^N' \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}_{ij} \cdot \mathbf{p}_j \right), \quad (3.16)$$

factorizando el momento dipolar, la ecuación anterior se puede escribir como,

$$\sum_{j=1}^N \left[\left\{ \delta_{ij}(\alpha_j^{-1}) + \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}_{ij} \right\} \cdot \mathbf{p}_j \right] = \mathbf{E}_{\text{inc},i}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.17)$$

aquí δ_{ij} es el delta de Kronecker y definiendo la matriz $\mathbb{B} \equiv \delta_{ij}(\alpha)^{-1} + \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}_{ij}$, entonces se tiene,

$$\sum_{j=1}^N \mathbf{B}_{ij} \cdot \mathbf{p}_j = \mathbf{E}_{\text{inc},i}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.18)$$

lo cual es un sistema de $3N$ ecuaciones complejas acopladas. Para valores grandes de N , es útil definir también los vectores de $3N$ -dimensiones: $\mathbf{P} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ y $\mathbf{E}_{\text{inc}} = (\mathbf{E}_{\text{inc},1}, \mathbf{E}_{\text{inc},2}, \dots, \mathbf{E}_{\text{inc},N})$, y la matriz simétrica \mathbb{B} de dimensión $3N \times 3N$, cuyos elementos satisfacen $\mathbb{B}_{3i-l,3j-m} = (\mathbb{B}_{ij})_{3-l,3-m}$, luego el problema se reduce a una ecuación matricial, llamada *ecuación fundamental de DDA*:

$$\tilde{\mathbb{B}}\tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\mathbf{E}}_{\text{inc}}. \quad (3.19)$$

Resolviendo la ecuación matricial anterior, es posible obtener las eficiencias de extinción y absorción en términos de los momentos dipolares por medio de las siguientes expresiones,

$$Q_{\text{ext}} = \frac{4k}{|a^2 \mathbf{E}_0|^2} \sum_{j=1}^N \text{Im} \left\{ \mathbf{E}_{j,\text{inc}}^* \cdot \mathbf{p}_j \right\}, \quad Q_{\text{abs}} = \frac{4k}{|a^2 \mathbf{E}_0|^2} \sum_{j=1}^N \left[\text{Im} \left\{ \mathbf{p}_j \cdot (\alpha_j^{-1})^* \mathbf{p}_j^* \right\} - \frac{2}{3} k^3 |\mathbf{p}_j|^2 \right], \quad (3.20)$$

donde a es el radio de la esfera y la eficiencia óptica de dispersión se obtiene de la diferencia de las eficiencias de extinción y absorción,

$$Q_{\text{dis}} = Q_{\text{ext}} - Q_{\text{abs}}. \quad (3.21)$$

La implementación del Método de la Aproximación de Dipolo Discreto, se encuentra en el software DDSCAT ([draine2013user](#)). Se hablará un poco más acerca de DDSCAT en la sección 4.2.2.

La Aproximación de Dipolo Discreto, tiene algunas limitaciones, estas son:

- **Tamaño de partícula limitado:** DDA funciona mejor para partículas que son significativamente más pequeñas que la longitud de onda de la luz incidente. Para partículas muy grandes, se requiere un gran número de dipolos, lo que puede ser computacionalmente costoso.
- **Orientación y forma de la partícula:** DDA asume una distribución discreta de dipolos en una malla regular, lo que limita su capacidad para modelar partículas con geometrías y orientaciones complejas.
- **Discretización espacial:** La resolución espacial de la malla de dipolos puede afectar la precisión de la simulación. Una malla muy gruesa puede llevar a una pérdida de detalles, mientras que una

malla muy fina aumenta la carga computacional.

- **Inhomogeneidad de materiales:** DDA a menudo supone que el material de la partícula es homogéneo, lo que puede no ser válido para partículas reales con estructuras internas complejas o regiones con diferentes propiedades ópticas.
- **Limitaciones en la longitud de onda:** El método puede no ser preciso para longitudes de onda muy cortas o muy largas en comparación con el tamaño de la partícula.
- **Interacciones a larga distancia:** La inclusión de interacciones a larga distancia en DDA puede ser computacionalmente costosa y complicada de manejar.
- **Polarización no lineal:** No es adecuado para estudiar efectos de polarización no lineal de la luz incidente.
- **Tamaño de matriz de dispersión:** El tamaño de la matriz de dispersión aumenta con el número de dipolos y la longitud de onda, lo que puede hacer que las simulaciones sean prohibitivamente grandes en algunos casos.
- **Condición de contorno periódica:** En sistemas dispersores no periódicos, la aplicación de condiciones de contorno periódicas puede llevar a resultados inexactos.
- **Tiempo de cálculo:** En general, las simulaciones DDA pueden ser intensivas en términos de tiempo de cálculo, especialmente para sistemas tridimensionales y grandes conjuntos de datos.

CAPÍTULO IV

HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES

4.1. Herramientas Computacionales

Para el desarrollo de este trabajo, se ha elaborado un listado de los requisitos necesarios para llevar a cabo la implementación de este estudio. Después de recabar información relevante sobre el tema en cuestión, se ha optado por utilizar Matlab como software de análisis numérico. Matlab, al ser un lenguaje de programación de alto nivel, facilita el trabajo con operaciones numéricas y resulta beneficioso para el procesamiento de simulaciones y modelización matemática.

Adicionalmente, se ha empleado el programa MiePlot como herramienta para la visualización y análisis de datos relacionados con partículas esféricas. Este programa es ampliamente utilizado en el campo de la ciencia de materiales y la física, especialmente para estudiar y simular la dispersión de la luz por partículas esféricas.

En el transcurso de la investigación, se ha hecho uso de la consola de MobaXterm para acceder a los servidores de LNS, donde se han llevado a cabo cálculos fundamentales utilizando DDSCAT 7.3. DDSCAT es un programa de código abierto que se utiliza para simular la dispersión de la luz por objetos arbitrarios, basado en la Aproximación de Dipolo Discreto.

Este enfoque meticuloso en la selección y aprovechamiento de herramientas ha permitido que la investigación avance de manera eficiente, y los resultados obtenidos han sido abordados con claridad y precisión.

4.1.1. Sistemas Operativos

Ranieri et al. ([ranieri2013sistemas](#)) indican que un sistema operativo es el software fundamental que permite a los usuarios interactuar con las máquinas, gestionando los datos, las aplicaciones y sus componentes. Dos sistemas operativos que se utilizan en la actualidad son Microsoft Windows y GNU Linux.

Microsoft Windows es un sistema operativo que actúa como intermediario entre el hardware de una computadora y los programas que se ejecutan; mientras que GNU Linux es un software libre e intuitivo, capaz de instalar y ejecutar todo tipo de aplicaciones, este fue diseñado para ser compatible con la arquitectura de diversas compañías para que pueda ser ejecutado, tanto en distintas plataformas hardware como en diferentes máquinas.

4.1.2. Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, Supercomputadora Cuetlaxcoapan

El Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, abreviado con “LNS” es una institución mexicana dedicada a la investigación, desarrollo tecnológico y capacitación en el campo de la supercomputación. Algunas de las actividades principales del Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México incluyen:

1. Investigación Científica y Tecnológica: El LNS lleva a cabo proyectos de investigación en áreas como la modelación y simulación computacional, la bioinformática, la física computacional, la meteorología, entre otras. Estos proyectos buscan resolver problemas complejos y avanzar en el conocimiento en diversos campos científicos y tecnológicos.
2. Servicios de Cómputo de Alto Rendimiento: El laboratorio ofrece acceso a recursos de supercomputación de vanguardia para investigadores y científicos tanto de México como del extranjero. Estos recursos permiten realizar cálculos intensivos y simulaciones computacionales de gran escala, facilitando la investigación en diversas disciplinas.
3. Capacitación y Formación: El LNS ofrece programas de capacitación y formación en supercomputación para estudiantes, investigadores y profesionales interesados en adquirir habilidades en este campo.
4. Colaboración Internacional: El laboratorio participa en proyectos de colaboración internacional con otros centros de investigación y universidades de todo el mundo. Estas colaboraciones permiten compartir conocimientos, recursos y experiencia en el área de la supercomputación.

Para acceder al “LNS”, se necesitan:

1. Conocimientos Técnicos: Se debe tener conocimientos técnicos en computación y programación para utilizar eficazmente los recursos del LNS. Esto puede incluir habilidades en programación paralela, optimización de código, gestión de datos y ejecución de trabajos en sistemas de cómputo de alto rendimiento.
2. Cumplimiento de Políticas y Normativas: Debes comprometerte a cumplir con las políticas y normativas establecidas por el LNS en relación con el uso de los recursos, la seguridad de la información, la propiedad intelectual y otros aspectos relevantes.

Respecto a los conocimientos técnicos, el comprender la línea de comandos de Linux es fundamental para la utilización de la supercomputadora, tanto para establecer una conexión y acceder a su cuenta, como para enviar tareas de cálculo y manipular de forma remota los datos generados. Los sistemas operativos Linux tienen por defecto de una aplicación que abre una sesión en el sistema usando un intérprete de comandos en modo de texto (también conocido como shell), ver Tabla 4.3 donde se muestran ejemplos de ejecución de estos. Aun cuando su computadora de escritorio, utilice un sistema operativo Windows, también requiere familiarizarse con el intérprete de comandos de Linux, ya que al conectarse a la supercomputadora Cuetlaxcoapan estará utilizando el sistema operativo Linux.

Tabla 4.3

Comandos básicos de gestión de ficheros y directorios en linux.

Comando	Descripción	Ejemplo
cat file	Muestra el contenido del archivo file	cat programa.f
cd dir	Cambiar del directorio actual a dir	cd programas
ls dir	Lista el contenido del directorio dir	ls programas
rm file	Elimina el archivo file	rm programa.c
cp file1 file2	Copia el archivo file1 a file2	cp programa.c programa1.c
pwd	Muestra la ruta del directorio actual	pwd
mkdir dir	Crea un nuevo directorio	mkdir resultados
rmdir dir	Elimina directorio	rmdir pruebas
man command	Despliega el manual de uso del comando	man ls
touch file	Crea un archivo vacío	touch programas/hola.c
mv arch dir	Mueve el archivo arch al directorio dir	mv hola.c programas
clear	Limpia la terminal	Clear
du -h dir	Reporta el tamaño del directorio dir	du -h
rm file	Elimina el archivo file	rm programa.c
grep patron arch	Busca una expresión en un archivo arch	grep OPEN programa.f

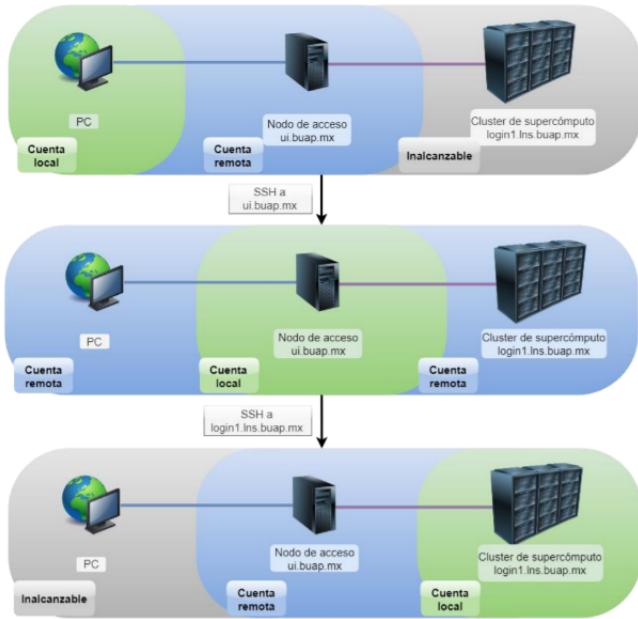
Acceso al Laboratorio Nacional de Supercómputo

SSH (Secure Shell), es un protocolo de comunicación para establecer una sesión remota en una computadora en forma segura usando la línea de comandos. Es la única opción permitida para acceder a la supercomputadora.

Debido a este método de acceso, es importante que comprenda los roles que toman los equipos de cómputo con los que interactúa con cada conexión SSH que establece, especialmente al realizar transferencias de archivos, ver Figura 4.14 donde se muestran los roles mencionados a continuación:

Figura 4.14

Etapas en la conexión al LNS.



Nota. Tomado de Martín-Ortiz ([Ortiz2019LNS](#)).

- Cuenta local: Cuenta en un equipo de cómputo u host, independiente de su ubicación física. Si se encuentra trabajando en la terminal de su computadora, pero se encuentra introduciendo comandos en el intérprete de comandos de su cuenta en ui.buap.mx, significa que en ese momento su cuenta local es ui.buap.mx.
- Cuenta remota: Cuenta en un equipo de cómputo u host a la cual puede conectarse por red desde su actual cuenta local. Si se encuentra trabajando en su cuenta de ui.buap.mx, es decir, en su cuenta local, las cuentas remotas a las cuales puede acceder son su cuenta en login1 y su cuenta en su computadora.
- Puede corroborar el equipo u host al cual se encuentra conectado verificando el prompt de su terminal, con el comando hostname.

Después de su primer inicio de sesión tanto en ui.buap.mx como en login1, deberá introducir una nueva contraseña de complejidad apropiada para sus conexiones subsecuentes.

4.1.3. SLURM

SLURM es un sistema de gestión de tareas y de clústeres. Los usuarios pueden interactuar con SLURM utilizando diversos comandos de terminal. Los más importantes para los usuarios del cluster son los siguientes:

Sbatch

Se utiliza para enviar un script de trabajo para su posterior ejecución. El script contendrá típicamente uno o más comandos srun para lanzar tareas paralelas.

Srun

Se utiliza para enviar un trabajo para su ejecución o iniciar pasos de trabajo en tiempo real. Srun tiene una amplia variedad de opciones para especificar los requisitos de los recursos, incluyendo: mínimo y máximo número de nodos, conteo de procesadores, y características específicas de nodos a usar (cuanta memoria, espacio en disco, ciertas características requeridas, etc.). Un trabajo puede contener varios pasos de trabajo que se ejecutan de forma secuencial o en paralelo en nodos independientes o compartidos dentro de la asignación de nodos del trabajo.

Squeue

Reporta el estado de los trabajos o pasos de trabajo. Cuenta con una amplia variedad de filtrado, clasificación y opciones de formato. Por defecto, reporta los trabajos que se están ejecutando en orden de prioridad y luego los trabajos pendientes ordenados también por prioridad.

Scancel

Se utiliza para cancelar un paso de trabajo o un trabajo pendiente o en ejecución. También puede ser usado para enviar una señal arbitraria a todos los procesos asociados con un trabajo en ejecución o paso de trabajo.

Scripts para Ejecución de Programas en SLURM

Un script es un pequeño archivo que contiene comandos para que un intérprete pueda ejecutarlos. En el caso de los scripts para SLURM, incluye tanto comandos para terminal, como directivas para

que SLURM configure la forma en que sus cálculos se ejecutarán en el cluster de supercómputo.

```
#!/bin/bash
# D=200NM P=0.25
export OMP_NUM_THREADS=6
hostname
date
bash -s <<< "time /home/asantos/ddscat7.3.2_170125_source_and_executables/01
_non_periodic_sp/src./ddscat"
date
```

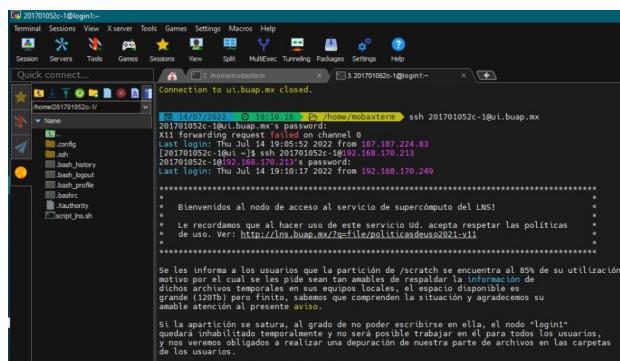
Listing 4.1: script_ddscat_txamula.sh

4.1.4. MobaXterm

Es un software de escritorio remoto para Windows, con herramientas de red, como comandos SSH, VNC, MOSH o FTP y Unix, en un solo archivo EXE portátil, lo que ayuda a conectarse y manejar tareas o aplicaciones desde computadoras remotas, ver Figura 4.15. Lo que permite crear diversas sesiones remotas y ejecutar comandos de Unix a través de terminales con pestanas. La herramienta gráfica incorporada incluye un visor de imágenes rápido, editor de texto, comparación de archivos/carpetas y funcionalidades de captura de paquetes, que deja a los desarrolladores arrastrar y soltar archivos directamente desde el servidor remoto utilizando una conexión SSH segura.

Figura 4.15

Interfaz de MobaXTerm



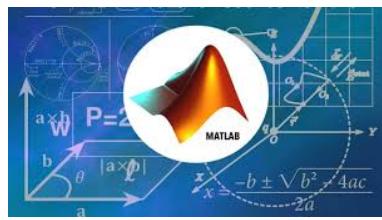
Nota. MobaXterm es una herramienta de software que proporciona una solución completa para la administración de sesiones remotas y el acceso a servidores desde una computadora local.

4.1.5. Matlab

Es una plataforma de programación y computación numérica utilizada por ingenieros y científicos para analizar datos, desarrollar algoritmos y crear modelos que permite, procesos de análisis y diseño iterativos con un lenguaje de programación que expresa las matemáticas de matriz y arreglo directamente, ver Figura 4.16 MathWorks. Incluye el Editor en vivo para crear scripts que combinan código, salida y texto formateado en un cuaderno ejecutable.

Figura 4.16

Interfaz de MATLAB



4.1.6. Overleaf

Cuenta con una gran variedad de plantillas para diversos proyectos que pueden descargarse para realizar las ediciones según el objetivo o meta que se tenga a lograr. Overleaf brinda la opción de invitar y compartir cada proyecto con otra persona para trabajar de manera colaborativa, ver Figura 5.21(jimenez2021introduccion).

Figura 4.17

Interfaz de la plataforma Overleaf

The screenshot shows the Overleaf platform's main dashboard. On the left, there's a sidebar with options like 'Nuevo proyecto', 'Proyecto vacío', 'Proyecto ejemplo', 'Subir proyecto', 'Importar desde GitHub', and various document types such as 'Planners', 'Academic Journal', 'Book', etc. The main area displays a list of 'Todos los proyectos' with columns for 'Título', 'Propietario', and 'Última modif.'. Each project entry includes a preview thumbnail, the owner's name, the time since modification, and a set of collaboration and sharing icons. At the top right, there's a user profile section with a picture, the email '114240014@correo.tecnm.mx', and buttons for 'Proyectos' and 'Cuenta'. A cookie consent banner at the bottom states 'Accept all cookies'.

Overleaf trabaja con el compilador de textos LaTeX, que pertenece al listado de software libre, diseñado para la composición y maquetación de textos, es un sistema de composición tipográfica de alta calidad, orientado a la producción de documentación técnica y científica, en LaTeX el resultado final no se visualiza conforme se va redactando, primero se escribe y luego se compila para visualizar el documento final.

Según indica ([jimenez2021introduccion](#)) parte de la filosofía de LaTeX es que el autor no debe preocuparse por la apariencia que tendrá al final el documento, sino que debe concentrarse por el contenido y la estructura de del trabajo, ver Figura 4.18, lo anterior puede resumir en esta frase: "Usted preocúpese de escribir y organizar su texto, que luego nos encargamos de que se vea bonito".

Figura 4.18

LATEX



Nota. Es un sistema de composición de textos, orientado a la creación de documentos escritos que presenten una alta calidad tipográfica.

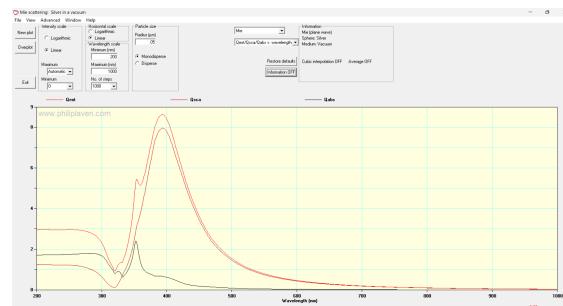
4.2. Herramientas para el Cálculo de Propiedades Ópticas

4.2.1. MiePlot

MiePlot ([MiePlot2021](#)) fue diseñado originalmente para proporcionar una interfaz simple (para PC que utilizan Microsoft Windows) al algoritmo clásico BHMIE (por sus siglas en inglés: "Boris H. B. Mie") para el cálculo de la dispersión de la Teoría de Mie desde una esfera, tal como se publicó en el libro titulado "Absorción y dispersión de luz por pequeñas partículas" de los autores Bohren y Huffman ([bohren2008absorption](#)). Además de los cálculos de dispersión de la Teoría Mie para longitudes de onda individuales, ver Figura 4.19, MiePlot ofrece cálculos para la dispersión de la luz solar y simulaciones de efectos ópticos atmosféricos (como arcoíris, coronas y glorias). El software MiePlot nos permite obtener eficiencias ópticas una vez que hemos identificado el grado de porosidad, el material a utilizar, las longitudes de onda a analizar y los tamaños a estudiar.

Figura 4.19

MiePlot



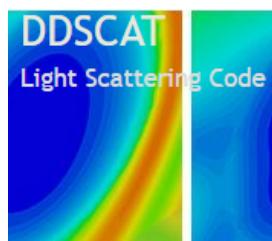
Nota. Eficiencias ópticas en función de la longitud de onda de una nanoesfera de Plata de radio de 50 nm (**bohren2008absorption**).

4.2.2. DDSCAT

DDSCAT (**draine2013user**) es un paquete de software desarrollado en el lenguaje de programación Fortran (**fortran1999**) para calcular la dispersión y absorción de ondas electromagnéticas por objetivos con geometrías arbitrarias utilizando la “Aproximación de Dipolos Discretos”(DDA)³, ver Figura 4.20. Donde la geometría se reemplaza por una matriz de dipolos puntuales (o, más precisamente, puntos polarizables), resolviendo el problema de dispersión electromagnética para una onda periódica incidente que interactúa con esta matriz de dipolos puntuales por medio de métodos iterativos. DDSCAT realiza la simulación numérica en relación con la extinción de la luz por partículas pequeñas, con tamaños comparables a la longitud de onda de la luz.

Figura 4.20

DDSCAT 7.3



Nota. El método de DDSCAT se basa en la aproximación de dipolo discreto, que modela el objeto dispersor como una colección de dipolos eléctricos distribuidos discretamente.

³Del inglés Discrete Dipole Approximation.

Uso de DDSCAT

Para realizar una ejecución en DDSCAT (**draine2013user**) es necesario el archivo de parámetros de entrada, conocido como **ddscat.par**; el archivo que define la geometría de interés; y finalmente el archivo que define el tipo de material de las nanoesferas mediante los valores del índice de refracción en función de la longitud de onda.

Un ejemplo del archivo **ddscat.par** se ejemplifica en el siguiente código, en donde las líneas importantes a modificar son:

- En la línea 9 se realiza la asignación de memoria inicial para la generación del objetivo.
- La línea 11 indica la geometría y composición del objetivo, en este caso ELLIPSOID, indica la forma elipsoide e incluye esfera y esferoide.
- En la línea 12 se definen los parámetros de 1-3, en la siguiente línea se apunta el número de materiales dieléctricos.
- En la línea 14 se señala el archivo del estudio, en este caso el archivo del índice de refracción con la porosidad a estudiar.
- La línea 16 muestra la opción de calcular el campo cercano.
- La línea 19 presenta la tolerancia de error.
- En la línea 21 se exhibe el número máximo de iteraciones permitidas.
- En la línea 27 se indica la longitud de onda en micras.
- En la línea 31 se indica el radio efectivo, esto con base al dato indicado en la línea 12.
- La línea 36 apunta a especificar el archivo de salida. Se guardan los cambios en el archivo y se ejecuta el DDSCAT usando el comando **ddscat>& ddscat.log&** para obtener varios archivos de ASCII cuando se complete el cálculo. 1.-Archivo **ddscat.log**; 2.-Archivo **mtable**; 3.-Archivo **qtable**; 4.-Archivo **qtable2**;

```
1 ' ===== Parameter file for v7.3 ====='
2 '**** Preliminaries ****'
3 'NOTORQ' = CMDTRQ*6 (DOTORQ, NOTORQ) -
4 'PBCGS2' = CMDSOL*6 (PBCGS2, PBCGST, GPBICG, QMRCCG, PETRKP)
```

```

5 'GPFAFT' = CMETHD*6 (GPFAFT, FFTMKL) -- FFT method
6 'GKDLDR' = CALPHA*6 (GKDLDR, LATTDR, FLTRCD) -- DDA method
7 'NOTBIN' = CBINFLAG (NOTBIN, ORIBIN, ALLBIN) -- binary output?
8 '***** Initial Memory Allocation *****'
9 200 200 200 = dimensioning allowance for target generation
10 '***** Target Geometry and Composition *****
11 'ELLIPSOID' = CSHAPE*9 shape directive
12 100 100 100 = shape parameters 1 - 3
13 1 = NCOMP = number of dielectric materials
14 'SiP_P25_refractive_index.dat' = file with refractive index
15 '***** Additional Nearfield calculation? *****
16 1 = NRFLD
17 0.2 0.2 0.2 0.2 0.2 (fract. extension of vol. in -x,+x,-y,+y,-z,+z)
18 '***** Error Tolerance *****
19 3.00e-3 = TOL = MAX ALLOWED (NORM OF |G>=AC|E>-ACA|X>)/(NORM OF AC|E>)
20 '***** Maximum number of iterations *****
21 2000 = MXITER
22 '***** Integration limiter for PBC calculations *****
23 1.00e-2 = GAMMA (1e-2 is normal, 3e-3 for greater accuracy)
24 '***** Angular resolution for calculation of <cos>, etc. *****
25 0.5 = ETASCA
26 '***** Vacuum Wavelengths (micron) *****
27 0.532 0.532 1 'LIN' = wavelengths
28 '***** Refractive index of ambient medium *****
29 1.0000 = NAMBIENT
30 '***** Effective Radii (micron) *****
31 0.100 0.100 1 'LIN' = a_eff (1st,last,howmany,how=LIN,INV,LOG,TAB)
32 '***** Define Incident Polarizations *****
33 (0,0) (1.,0.) (0.,0.) = Polarization state e01 (k along x axis)
34 1 = IORTH
35 '***** Specify which output files to write *****
36 1 = IWRKSC
37 '***** Specify Target Rotations *****
38 0. 0. 1 = BETAMI, BETAMX, NBETA
39 0. 0. 1 = THETMI, THETMX, NTHETA
40 0. 0. 1 = PHIMIN, PHIMAX, NPHI
41 '***** Specify first IWAV, IRAD, IORI (normally 0 0 0) *****
42 0 0 0 = first IWAV, first IRAD, first IORI
43 '***** Select Elements of S_ij Matrix to Print *****

```

```

44 0 = NSMELTS = number of elements of S_ij to print
45 11 12 21 22 31 41 = indices ij of elements to print
46 '***** Specify Scattered Directions *****'
47 'LFRAME' = CMDFRM (LFRAME, TFRAME for Lab Frame or Target Frame)
48 0 = NPLANES = number of scattering planes
49 0. 0. 180. 5 = phi, theta_min, theta_max (deg) for plane A

```

Listing 4.2: ddscat.par

El archivo que define la geometría se genera automáticamente al utilizar la subrutina ELLIPSOID contenida en el programa DDSCAT para la generación de las nanoesferas. Esta subrutina se describe en la siguiente sección.

Construcción de las nanoesferas en DDSCAT

Para la construcción de las nanoesferas en DDSCAT, se utiliza la subrutina ELLIPSOID (**draine2013user**), la cual define un elipsoide con la siguiente ecuación:

$$\left(\frac{x_{TF}}{\text{SHPAR}_1 d}\right)^2 + \left(\frac{y_{TF}}{\text{SHPAR}_2 d}\right)^2 + \left(\frac{z_{TF}}{\text{SHPAR}_3 d}\right)^2 = \frac{1}{4}. \quad (4.22)$$

donde d es el espaciado entre dipolos.

En nuestro caso necesitamos construir una esfera homogénea e isotrópica, por lo que ésta se obtiene estableciendo $\text{SHPAR}_1 = \text{SHPAR}_2 = \text{SHPAR}_3 = D/d$, donde D es el diámetro de la esfera. Sustituyendo $\text{SHPAR}_1 = \text{SHPAR}_2 = \text{SHPAR}_3$ en la ecuación 4.22, se tiene la relación de SHPAR con el número de dipolos de la geometría, N ,

$$\text{SHPAR} = \left(\frac{6N}{\pi}\right)^{1/3}. \quad (4.23)$$

Aplicabilidad de DDA

La principal ventaja de la DDA es que es completamente flexible con respecto a la geometría del objetivo, siendo limitado solo por la necesidad de usar una separación interdipolar d pequeña en comparación con el radio efectivo del objetivo, dada por la siguiente ecuación,

$$a_{eff} \equiv (3V/4\pi)^{\frac{1}{3}} \quad (4.24)$$

Otra limitante del método de DDA es que la separación interdipolar tiene que ser menor que la longitud de onda λ de la radiación incidente. Estudios numéricos por Draine y Goodman (**draine1993beyond**); y Draine y Flatau (**draine1994discrete**) indican que el segundo criterio se cumple adecuadamente si,

$$|m|kd < 1, \quad (4.25)$$

donde m es el índice de refracción complejo del material del objetivo, y $k \equiv 2\pi/\lambda$, donde λ es la longitud de onda en el vacío. Este criterio es válido siempre y cuando $|m - 1| \lesssim 3$ o así. Cuando la parte imaginaria del índice de refracción se vuelve grande, la solución DDA tiende a sobreestimar la sección transversal de absorción C_{abs} , y puede ser necesario utilizar separaciones interdipolares d más pequeñas que las indicadas por la ecuación 4.25 para reducir los errores en C_{abs} a valores aceptables. Si se desean cálculos precisos de la función de fase de scattering (por ejemplo, secciones transversales de radar o lidar), se debe utilizar un criterio más conservador,

$$|m|kd < 0.5. \quad (4.26)$$

CAPÍTULO V

SILICIO Y SILICIO POROSO

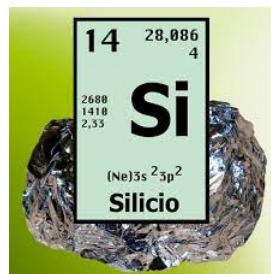
5.1. Silicio

Es un elemento químico no metálico, con número atómico 14 del grupo 4 de la tabla periódica, es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre después del oxígeno, se presenta en forma amorfa y cristalizada; transmite más del 95 % de las longitudes de onda de la radiación infrarroja (quimica.es).

Se utiliza en aleaciones, debido a que es un material semiconductor abundante, la industria tiene un interés especial por sus aplicaciones en la electrónica y microelectrónica como material para la creación de obleas o chips que se pueden implantar en transistores, pilas solares y una gran variedad de circuitos electrónicos. Su resistividad a la corriente eléctrica a temperatura ambiente varía entre la de los metales y la de los aislantes, la conductividad del silicio se puede controlar añadiendo pequeñas cantidades de impurezas.

Figura 5.21

Elemento químico Silicio.



Nota. El Silicio es un elemento esencial en la industria moderna y la tecnología. Su versatilidad y propiedades únicas lo hacen invaluable en una amplia gama de aplicaciones.

5.2. Silicio Poroso

Una de las ventajas fundamentales de trabajar con SiP es la posibilidad de obtener, mediante un proceso accesible y con variables de control morfológico, distribuciones teóricas de índice de refracción, como estructuras en el orden del micrómetro o nanómetro de forma que las ondas electromagnéticas se verán afectadas con efectos análogos a los que sufre un electrón en un potencial periódico, en longitudes de onda en el rango visible, denominados como; cristales fotónicos (CF).

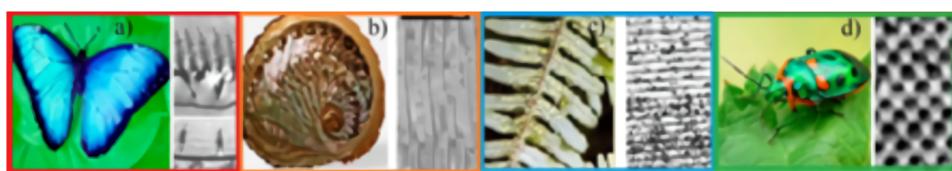
Algunos de los ejemplos básicos de los cristales fotónicos los encontramos en la naturaleza,

por ejemplo; en alas de las mariposas, las conchas de abulón y algunos helechos tropicales, ver Figura 5.22, cuya coloración no proviene de pigmentos, sino del efecto de la luz incidiendo en los cristales fotónicos provocando un efecto similar a colores iridiscentes.

El SiP se fabrica a partir de las obleas de Silicio cristalino, cuyo proceso consiste en colocar una oblea entre dos contactos eléctricos, uno de tungsteno y otro de aluminio, arreglo que permite poner una de las caras de la oblea en contacto con una sustancia conocida como electrolito; el comúnmente empleado es una combinación de ácido fluorhídrico y etanol (**CioMX**).

Figura 5.22

Colores iridiscentes en la naturaleza.



Nota. a) Alas de mariposa b) Conchas de abulón c) Helechos d) Escarabajos. En la parte derecha de cada figura se observa la imagen de microscopio de barrido electrónico (SEM). Tomado de Morales (**CioMX**).

5.3. Índice de refracción del Silicio Poroso: Modelo de Bruggeman

El modelo Bruggeman, es una relación matemática usada para determinar la dependencia del índice de refracción del Silicio Poroso con la longitud de onda de la radiación incidente, el cual establece que, si se considera un medio sin perdidas, la expresión que describe el índice de refracción de Silicio Poroso está dada por (**estrada2018**),

$$P \left(\frac{n_p^2 - n_{SiP}^2}{n_p^2 + 2n_{SiP}^2} \right) + (1 - P) \left(\frac{n_{Si}^2 - n_{SiP}^2}{n_{Si}^2 + 2n_{SiP}^2} \right) = 0, \quad (5.27)$$

donde,

- P es la fracción de porosidad y toma valores de 0-1 (0-100/
- n_p es el índice de refracción del material contenido en los poros.
- n_{SiP} es el índice de refracción buscado del Silicio Poroso.
- n_{Si} es el índice de refracción del silicio puro, tomado de Green (**green2008self**).

5.3.1. Implementación del Modelo de Bruggeman en Matlab

Para el desarrollo de este trabajo de investigación es necesario calcular las propiedades ópticas de sistemas de nanoesferas de SiP a diferentes niveles de porosidad, en el intervalo del espectro electromagnético visible y ultravioleta, por lo que es importante conocer la dependencia del índice de refracción en función de la longitud de onda.

En el siguiente código se encuentra la implementación del cálculo del índice de refracción del Silicio Poroso con el modelo de Bruggeman presentado en la sección 5.3.

```
1 bruggemanReal = @(P,nSi,nv,nPS) P*((nv^2-nPS^2)/(nv^2+2*nPS^2))+(1-P)*((nSi^2-nPS
2)^2/(nSi^2+2*nPS^2));
2 bruggemanImag = @(P,kSi,kv,kPS) -(kPS^2)/(kSi^2)+(kv^2)/(kSi^2)+(1-P)*((1-(kv^2)/(kSi^2))*(kPS^2/kSi^2)^(1/3));
3
4 data = load("Si.dat");
5 wl = data(:,1);
6 n = data(:,2);
7 k = data(:,3);
8 length(wl);
9
10 lambda = .250:.001:1.450;
11 nSiInterp = interp1(wl,n, lambda, 'spline');
12 kSiInterp = interp1(wl,k, lambda, 'spline');
13 length(lambda);
14
15 P = 0.25;
16 nv = 1.0;
17 kv = 0.0;
18
19 nBruggeman = zeros(1,length(lambda),"single");
20 kBraggeman = zeros(1,length(lambda),"single");
21
22 for i=1:length(lambda)
23     nSi = nSiInterp(i);
24     kSi = kSiInterp(i);
25     funreal = @(nPS) bruggemanReal(P,nSi,nv,nPS);
26     funImag = @(kPS) bruggemanImag(P,kSi,kv,kPS);
27     nBruggeman(i) = fzero(funreal, 4);
```

```

25 kBruggeman(i) = fzero(funImag, 0.04);
26
27 end
28
29
30

```

Listing 5.3: Índice de refracción

En las líneas 1 y 2 se definen las partes real e imaginaria del modelo de Bruggeman. Estas expresiones se almacenan en las variables `bruggemanReal` y `bruggemanImag`, respectivamente.

En la línea 4 se lee el archivo `Si.dat`, el cual contiene los valores experimentales del Silicio cuando no tiene poros. Los datos experimentales proporcionan resultados medibles para ser evaluados. Estos resultados son la base para sacar conclusiones respecto al índice de refracción del Silicio Poroso. Estos valores fueron obtenidos de Green (**green2008self**).

Los valores de la longitud de onda se almacenan en la variable `wl`, la parte real del índice de refracción en la variable `n`, y la parte imaginaria del índice se guarda en la variable `k`.

En las líneas 10 a 13 se realiza una interpolación de la parte real e imaginaria del índice de refracción del Silicio en el intervalo de 250 nm a 1450nm, con un tamaño de paso de 1 nm. Estos valores se almacenan en las variables `nSiInterp` y `kSiInterp`.

En la línea de la 15 a 17 se indica la fracción de porosidad del Silicio Poroso, así como la parte real e imaginaria del índice de refracción del material contenido en las cavidades porosas, definidas por `nv` y `kv`, respectivamente.

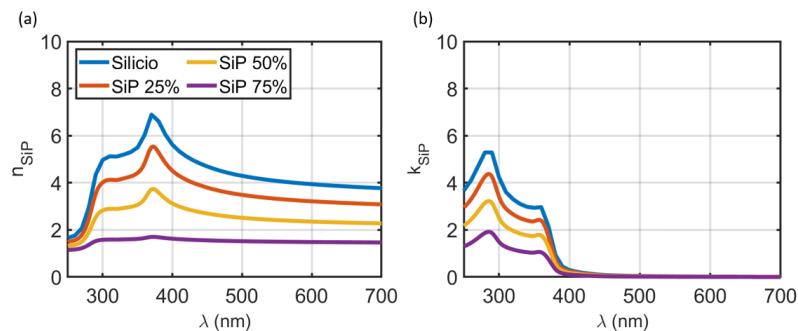
Finalmente, en las líneas 22 a 29 se resuelve numéricamente el modelo de Bruggeman para la obtención de la parte real e imaginaria del índice de refracción del Silicio Poroso en función de la longitud de onda. Este resultado se almacena en las variables `nBruggeman` para la parte real y en `kBruggeman` para la parte imaginaria.

En la Figura 5.23, se muestra la parte real e imaginaria del índice de refracción del Silicio Poroso obtenido con la implementación descrita anteriormente, considerando fracciones de porosidad de 0.25, 0.50, y 0.75. La línea azul representa los valores experimentales del Silicio cuando no tiene poros.

De las gráficas se puede observar que los valores del índice de refracción disminuyen a medida que se aumenta el porcentaje de porosidad. También se observa que la característica resonante en $\lambda=370$ nm se atenúa al aumentar la porosidad en el silicio.

Figura 5.23

Índice de refracción del Silicio Poroso obtenido con el modelo de Bruggeman.



(a) Parte real y (b) parte imaginaria del índice de refracción del silicio puro (línea azul) y poroso para diferentes valores de porcentaje de porosidad. 25 % (línea roja), 50 % (línea amarilla) y 75 % (línea morada).

CAPÍTULO VI

EFICIENCIAS ÓPTICAS DE

NANOESFERAS DE SiP USANDO LA

TEORÍA DE MIE

6.1. Eficiencias Ópticas de Nanoesferas de SiP Usando la Teoría de Mie

Las eficiencias ópticas son cruciales en el diseño y desarrollo de tecnologías relacionadas con sistemas de comunicación óptica. Comprender cómo interactúa la luz con un material es fundamental para optimizar estos dispositivos, ya que proporcionan información sobre las propiedades intrínsecas del material, como su estructura, composición química, pureza, defectos y comportamiento bajo diferentes condiciones ambientales. Comprender cómo absorbe, refleja y transmite la luz un material ayuda a mejorar su eficiencia energética, esto es esencial para la investigación y desarrollo de materiales con propiedades ópticas mejoradas.

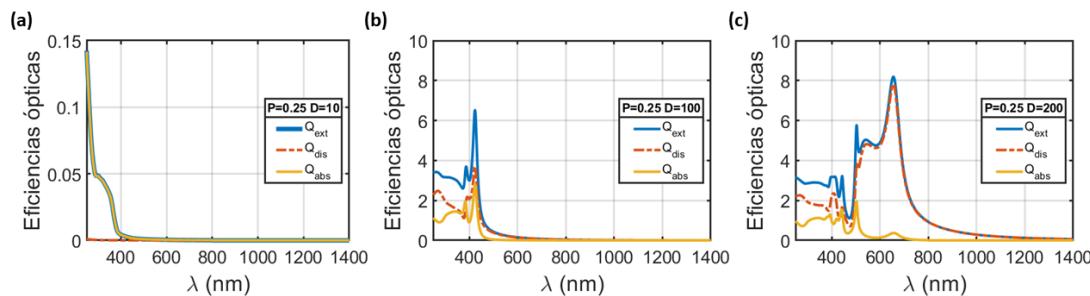
Nanoesferas con Fracción de Porosidad Igual a 0.25

Las eficiencias ópticas para las nanoesferas de SiP con diámetro de 10 nm y porosidad (P) $P=0.25$ se muestran en la Figura 6.24, la línea en color azul, representa la eficiencia de extinción (Q_{ext}), la línea punteada en color rojo se refleja la eficiencia de dispersión (Q_{dis}), y la eficiencia de absorción se ilustra con la línea en color amarillo. En el inciso (a), se puede observar que no hay dispersión de la luz para el intervalo de longitud de onda considerado (200 nm-1400 nm) (línea roja) y la contribución a la eficiencia de extinción es únicamente por absorción de la luz, en el intervalo ultravioleta (200 nm-400 nm). Es notorio también que la escala en el eje "Y" del inciso (a) es considerablemente menor que la escala para las nanoesferas de diámetro de 100 nm y 200 nm que corresponden a la Figura 6.24 inciso (b) y (c), respectivamente.

En la figura() se visualiza la respuesta óptica de nanoesferas de diámetro de 10nm, 100nm y 200nm con porosidad de 0,25 en los casos,

Figura 6.24

Eficiencias ópticas de nanoesferas de SiP con $P = 0.25$.



Nota. La respuesta óptica es proporcional al tamaño de la nanoesfera.

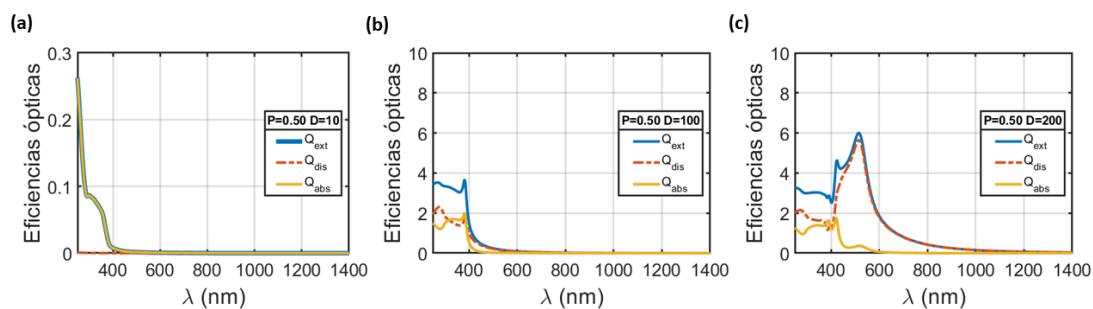
En la Figura 6.24, inciso (b) la nanoesfera con diámetro de 100 nm, la eficiencia de extinción de la luz (línea color azul) es dada por la eficiencia de dispersión (línea roja punteada) mostrando una mejor respuesta en comparación con el inciso (a) y con contribución de la absorción (línea amarilla). El inciso (c) corresponde a una nanoesfera con tamaño de 200 nm, se aprecia que la extinción de la luz es ocasionada principalmente por la dispersión de la luz (línea roja punteada), ocasionado por el aumento del área superficial de la nanoesfera, además, de que se pueden apreciar picos originados por modos resonantes en la nanoesfera, estos resultados son esperados de acuerdo a lo reportado por **bohren2008absorption**. Este resultado difiere a los obtenidos de la nanoesfera de diámetro de 10 nm.

Nanoesferas con Fracción de Porosidad Igual a 0.50

En la Figura 6.25 inciso (a) se presentan los resultados de la nanoesfera con diámetro de 10 nm, donde se puede observar que el intervalo del eje "Y" disminuye al aumentar la fracción de porosidad, en el cual se representa que no hay dispersión y la contribución a la eficiencia de extinción es principalmente por el mecanismo de absorción en la región del espectro ultravioleta, en el inciso (b) para la nanoesfera de diámetro de 100 nm con $P=0.50$, la eficiencia de extinción es una contribución de las eficiencias de absorción y dispersión. En el inciso (c) la nanoesfera con diámetro de 200 nm, ilustra picos, ocasionados por modos ópticos resonantes en la nanoesfera, similares a los observados por **quinten2010optical**, caso similar al presentado en la Figura 6.24 (c) con fracción de porosidad de 0.25.

Figura 6.25

Eficiencias ópticas de nanoesferas de SiP con $P = 0.50$.



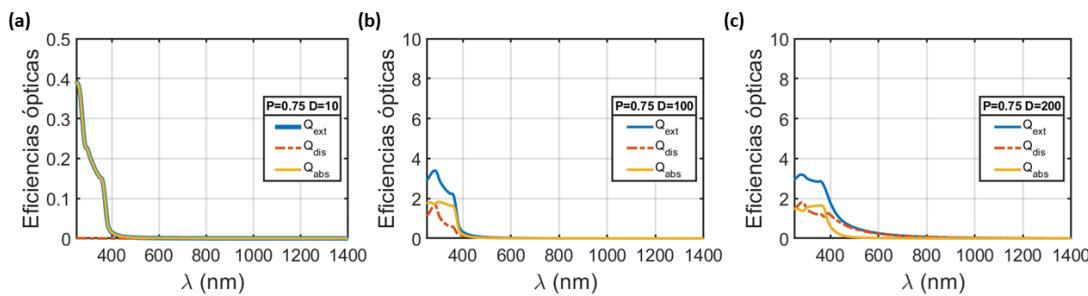
Nota. En las gráficas, la eficiencia de absorción (Q_{abs}) se representa en color amarillo, la eficiencia de dispersión (Q_{dis}) en color rojo y la eficiencia de extinción (Q_{ext}) en color azul.

Nanoesferas con Fracción de Porosidad Igual a 0.75

En la Figura 6.26 inciso (a) se presentan las eficiencias ópticas de una nanoesfera de SiP de 10 nm de diámetro con fracción de porosidad $P=0.75$. Se observa que la eficiencia de extinción es originada por la eficiencia de absorción y para el caso de nanoesferas con tamaño menor, este resultado es general para partículas pequeñas, no importando el valor en la fracción de porosidad. A medida que se incrementa el tamaño de la nanoesfera, aumenta la contribución del proceso de dispersión en la eficiencia de extinción, ver Figura 6.26 (b) y (c). Cuando se tiene un alto nivel de porosidad, en este caso $P=0.75$, se puede observar cómo los modos resonantes disminuyen en intensidad, ver Figura 6.26 (c), en comparación con los casos con $P=0.25$ y $P=0.50$, presentadas en las Figuras 6.24 (c) y 6.25 (c).

Figura 6.26

Eficiencias ópticas de nanoesferas de SiP con $P = 0.75$.



Nota. A mayor porosidad, se tiene menor respuesta óptica.

6.2. Análisis de Resultados

En lo anterior se han calculado las eficiencias ópticas usando la Teoría de Mie para nanoesferas con diámetros de 10, 100 y 200 nm, con diferentes valores de fracción de porosidad.

De los resultados obtenidos se puede destacar que para nanoesferas pequeñas, se observa que la respuesta óptica está en la región UV (200-400 nm); también que el mecanismo de dispersión no influye en la extinción de la luz, la cual es originada por el mecanismo de absorción, para todos los valores en la fracción de porosidad, ver Figuras 6.24 (a), 6.25 (a) y 6.26 (a). Al aumentar el tamaño de la esfera, la respuesta óptica se desplaza a longitudes de onda grandes(200-800 nm), y la dispersión comienza a ser importante en la contribución a la extinción de la luz, debido al aumento en el área superficial de la nanoesfera, estos resultados son similares a los reportados para nanoesferas de otros

materiales dieléctricos y metálicos **quinten2010optical**.

Respecto a la influencia de la porosidad en las eficiencias ópticas, de los resultados obtenidos se puede distinguir que para nanoesferas pequeñas, a medida que aumenta el valor en la fracción de porosidad, la respuesta óptica aumenta; y para nanoesferas grandes, la respuesta óptica disminuye. Además, para valores en la fracción de porosidad de 0.25 y 0.50 surgen resonancias ópticas manifestadas por picos abruptos en las eficiencias ópticas para tamaños de nanoesferas de 100 y 200 nm de diámetro, indicando la forma esférica de la nanopartícula **bohren2008absorption**. Este efecto no aparece para una fracción de porosidad alta de $P = 0.75$ ya que se pierde la forma esférica de las nanopartículas.

CAPÍTULO VII

ESTUDIO DE LA CONVERGENCIA

NUMÉRICA DE NANOESFERAS DE

SILICIO POROSO CON EL ALGORITMO

DE DDA

7.1. Construcción de nanoesferas en función del número de dipolos.

En este capítulo se presentan los resultados del estudio de la convergencia numérica de la eficiencia de extinción de nanoesferas de SiP usando el código DDSCAT, en función del tamaño de la discretización (número de dipolos) y en función de la fracción de porosidad. Los diámetros de las nanoesferas consideradas son, 200 nm, 100 nm y 50 nm con fracciones de porosidad de 0.25, 0.50 y 0.75. Estos resultados se comparan con los valores exactos obtenidos en sección previa con la Teoría de Mie, sección 6.1. La discretización de la geometría se refiere al proceso en el que se divide una forma finita en formas continuas, o discretas, en este contexto la nanoesfera que se divide en múltiples dipolos. Los dipolos son pequeñas unidades, cuantos más dipolos haya, más detallada y precisa será la representación de la nanoesfera. La variable SHPAR influye en cómo se realiza la discretización. La relación entre el número de dipolos y SHPAR se presenta en la Tabla 7.4. En la Figura 7.27 se ilustran diferentes nanoesferas construidas con varios valores de SHPAR. Al observar esta Figura, se puede notar que cuando aumenta el número de dipolos, la geometría se aproxima más a una esfera ideal.

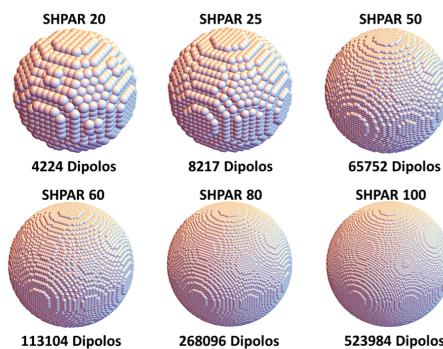
Tabla 7.4

Relación entre SHPAR y el número de dipolos para la construcción de una nanoesfera.

SHPAR	NÚM. DE DIPOLOS
20	004224
25	008217
50	065752
60	113104
80	268096
100	523984

Figura 7.27

Construcción de nanoesferas en función del número de dipolos.



7.2. Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP utilizando DDSCAT en función de la discretización y de la fracción de porosidad

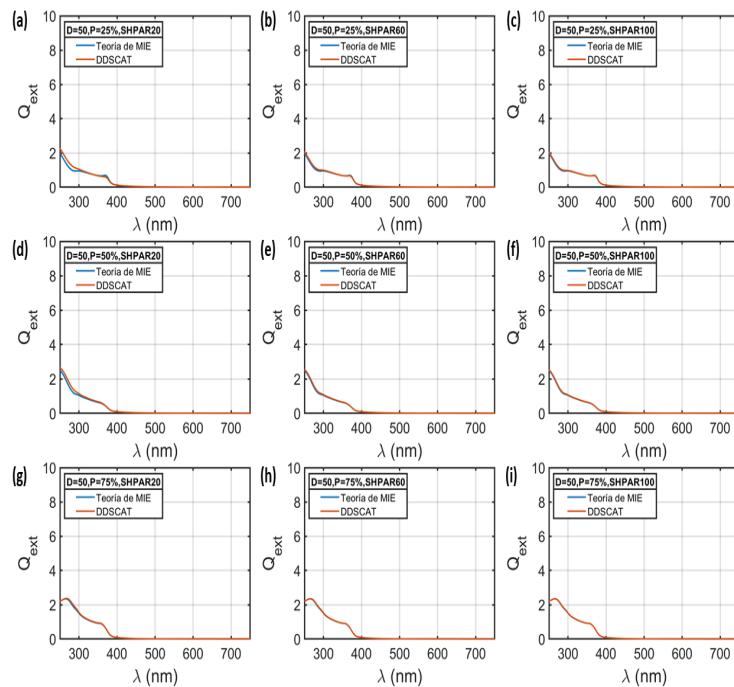
7.2.1. Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP de 50 nm de diámetro

En la Figura 7.28 se visualizan los resultados gráficos del cálculo de la eficiencia de extinción de nanoesferas SiP considerando tres fracciones de porosidad y tres diferentes valores en la discretización, definidos en la Tabla 7.4, para la construcción de la nanoesfera de SiP. El estudio de la eficiencia de extinción está en el intervalo de longitudes de onda de $\lambda=250$ nm a $\lambda=750$ nm que corresponde a la región del ultravioleta y visible, los resultados obtenidos con DDSCAT se observan en la línea color rojo y en línea color azul los resultados de la Teoría de Mie.

En los incisos (a), (b) y (c) $P=0.25$; en (d), (e) y (f) $P=0.50$; y en (g), (h) y (i) $P=0.75$. Los resultados considerando SHPAR=20 están en los incisos (a), (d) y (g); el cálculo con SHPAR=60 corresponden a los incisos (b), (e) y (h); y en los incisos (c), (f) e (i) el cálculo fue con SHPAR=100.

Figura 7.28

Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP con $D=50$ nm en función de la discretización y de la fracción de porosidad.



Nota. Eficiencias de extinción con diámetro de 50 nm para SHPAR 20, 60 y 100.

Para este tamaño de nanoesfera, la solución calculada con DDSCAT cualitativamente no se diferencia notablemente de la solución con la Teoría de Mie, no importando el valor en la fracción de porosidad, a excepción del caso con $P=0.25$ y $SHPAR=20$, en la cual hay una ligera desviación entre las dos soluciones.

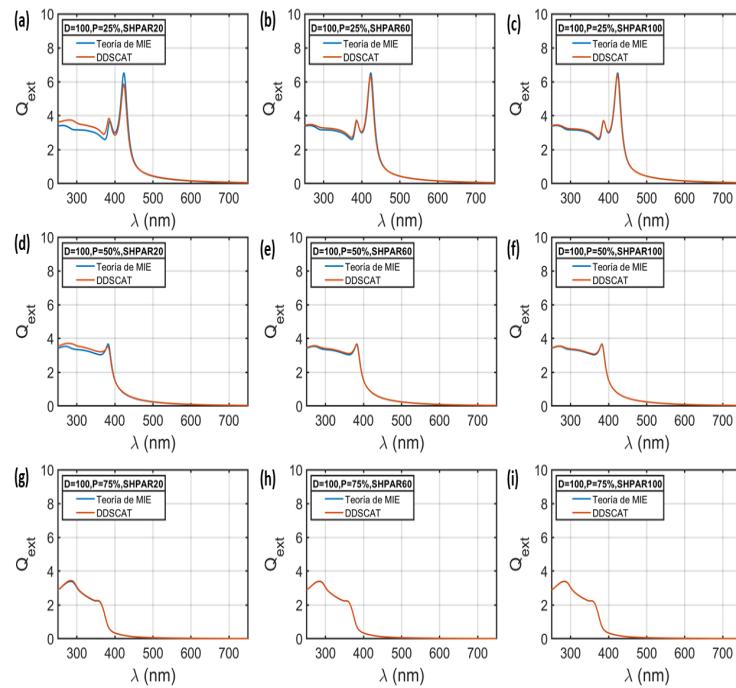
7.2.2. Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP de 100 nm de diámetro

A continuación se muestran las gráficas de las eficiencias de extinción para nanoesferas de SiP con diámetro de 100 nm, como en la Figura 7.28.

Donde se puede observar que la solución con DDSCAT se aproxima a la solución exacta de la Teoría de Mie, para todos los casos de fracción de porosidad, al aumentar el número de dipolos, ver Figura 7.29, también se visualiza que una fracción de porosidad grande permite utilizar un número menor de dipolos para describir la eficiencia de extinción con DDSCAT.

Figura 7.29

Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP con $D=100\text{ nm}$ en función de la discretización y de la fracción de porosidad.



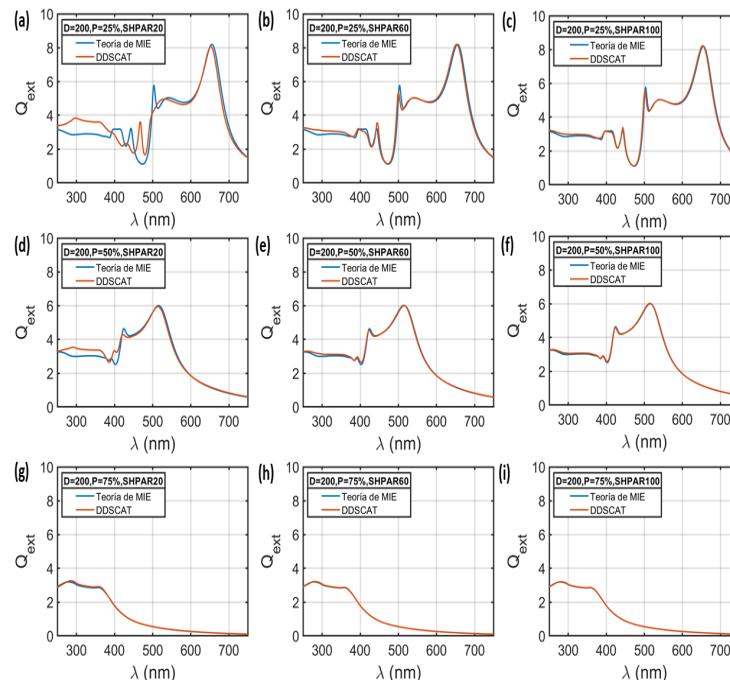
Resultados de estudio DDSCAT (línea color rojo), valores de la Teoría de Mie (línea color azul).

7.2.3. Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP con 200 nm de diámetro

En la Figura 7.30 se grafican las eficiencias de extinción para nanoesferas de SiP de diámetro de 200 nm obtenidas con DDSCAT (líneas color rojo), considerando valores de SHPAR igual a 20, 60 y 100, y de acuerdo con la Tabla 7.4 corresponden a 4224, 113104 y 523984 dipolos respectivamente. Las eficiencias de extinción calculadas con DDSCAT se comparan con las obtenidas con la Teoría de Mie (líneas color azul) en el intervalo de longitudes de onda que van de 250 nm a 750 nm. De las gráficas que se muestran en la Figura 7.30, se puede observar que al aumentar el número de dipolos, la solución obtenida con el método de DDA se aproxima a la solución exacta obtenida con la Teoría de Mie, esto para todas las fracciones de porosidad consideradas. También se ilustra que la solución con DDSCAT se separa más de la solución exacta para valores pequeños en la fracción de porosidad ($P=0.25$) en comparación con los resultados de valores grandes en la fracción de porosidad ($P=0.75$), este resultado es esperado, pues el índice de refracción del Silicio Poroso tiene cambios abruptos para fracciones de porosidad pequeña, como se señaló en la Figura 5.23 de la sección 5.3.1.

Figura 7.30

Eficiencias de extinción de nanoesferas de SiP con $D=200\text{ nm}$ en función de la discretización y de la fracción de porosidad.



Nota. Resultados de estudio DDSCAT (línea color rojo), valores de la Teoría de Mie (línea color azul).

7.2.4. Análisis de resultados

Se puede concluir parcialmente que para nanoesferas se requiere un número menor de dipolos para alcanzar la convergencia numérica en comparación con las nanoesferas de 100 y 200 nm de diámetro, las cuales necesitan un mayor número de dipolos para aproximarse a la solución exacta obtenida con la Teoría de Mie. Por otra parte, cuando se tiene baja porosidad, la nanoesfera de SiP requiere de un mayor número de dipolos para alcanzar la convergencia en comparación con valores grandes en la fracción de porosidad alta. Este resultado se puede atribuir, a que, el índice de refracción del SiP a baja porosidad cambia abruptamente en el intervalo de longitudes de onda consideradas, ver Figura 5.23. En las siguientes secciones se presenta un análisis cuantitativo de la convergencia numérica de DDSCAT en la eficiencia de extinción.

7.3. Error Cuadrático Medio de las eficiencias de extinción obtenidas con DDSCAT

En lo siguiente se presenta el análisis del Error Cuadrático Medio (ECM) de las de las eficiencias de extinción obtenidas con DDSCAT, presentadas en la sección anterior, en comparación con la solución exacta obtenida con la Teoría de Mie, sección 6.1. El ECM calculado se hace en todo el intervalo de longitudes de onda consideradas, de 250 nm a 750 nm, y se obtiene con la siguiente ecuación,

$$\text{ECM} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Q_{\text{ext}}^{\text{Mie}}(\lambda_i) - Q_{\text{ext}}^{\text{DDA}}(\lambda_i))^2, \quad (7.28)$$

donde n es el número de longitudes de onda, $Q_{\text{ext}}^{\text{Mie}}(\lambda_i)$ es la eficiencia de extinción calculada con la Teoría de Mie en la longitud de onda λ_i , y $Q_{\text{ext}}^{\text{DDA}}(\lambda_i)$ es la eficiencia de extinción calculada con DDSCAT en λ_i . El ECM da una medida de la desviación general entre las dos soluciones: mientras más pequeño sea el ECM más cercano será la solución aproximada $Q_{\text{ext}}^{\text{DDA}}$ a la solución exacta $Q_{\text{ext}}^{\text{Mie}}$.

7.3.1. ECM de nanoesferas de diámetro de 50 nm

En la Tabla 7.5 se muestran los resultados de la métrica del ECM para las nanoesferas de SiP de diámetro de 50 nm, con valores de porosidad de 0.25, 0.50 y 0.75, en función de la variable SHPAR. De los resultados obtenidos se observa que para todos los casos, el ECM disminuye conforme aumenta el número de dipolos mediante la variable SHPAR.

Tabla 7.5

ECM de las eficiencias de extinción en nanoesferas con diámetro de 50 nm.

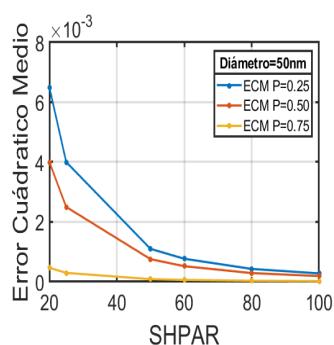
SHPAR	ECM(P=0.25)	ECM(P=0.50)	ECM(P=0.75)
20	6.50E-03	4.00E-03	4.690E-04
25	4.00E-03	2.50E-03	2.970E-04
50	1.10E-03	0.75E-03	0.884E-04
60	0.77E-03	0.52E-03	0.621E-04
80	0.43E-03	0.29E-03	0.339E-04
100	0.28E-03	0.19E-03	0.225E-04

Nota. ECM de la eficiencia de extinción para nanoesferas de SiP con diámetro de 50 nm, mediante la diferencia de DDSCAT con la solución exacta, para diferentes valores en la fracción de porosidad, en función de la variable SHPAR.

En la Figura 7.31, se grafica el ECM con los datos presentados en la Tabla 7.5. Se observa el comportamiento descendiente del ECM, cuando aumenta el número de dipolos en la nanoesfera de SiP. Y como en los casos anteriores de tamaños de nanoesferas de 100 nm y 200 nm, el valor del ECM es mayor cuando la fracción de porosidad es pequeña, P=0.25, en comparación con los valores para fracciones de porosidad de P=0.50 y P=0.75. También es importante notar que el ECM es pequeño de acuerdo con los valores indicados en el eje vertical de la gráfica, incluso para un número pequeño de la variable SHPAR en comparación con los valores del ECM para nanoesferas de SiP de diámetros de 100 y 200 nm. Esto concuerda con el resultado cualitativo observado en la sección previa.

Figura 7.31

Gráficas del error cuadrático medio de las nanoesferas de diámetro de 50 nm.



Nota. Se muestran las 3 fracciones de porosidad, en línea color azul P=0.25, en color rojo P=0.50, y la línea color amarillo representa a la fracción de porosidad P=0.75.

7.3.2. ECM de nanoesferas de diámetro de 100 nm

En la Tabla 7.6 están los resultados numéricos del ECM de las nanoesferas de diámetro de 100 nm, considerando las tres fracciones de porosidad (0.25, 0.50 y 0.75). Como se muestra en la Tabla, el error es menor a medida que se incrementa el número de puntos polarizables en la construcción de la geometría esférica indicada por la variable SHPAR.

Tabla 7.6

ECM de las eficiencias de extinción en nanoesferas con diámetro de 100 nm.

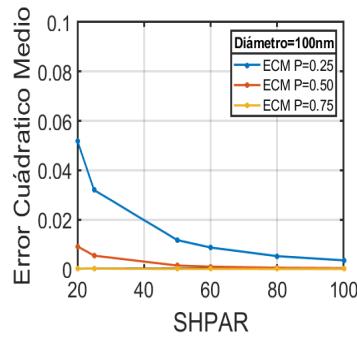
SHPAR	ECM(P=0.25)	ECM(P=0.50)	ECM(P=0.75)
20	5.19E-02	9.20E-03	1.950E-04
25	3.20E-02	5.40E-03	1.100E-04
50	1.17E-02	1.40E-03	0.173E-04
60	0.87E-02	0.94E-03	0.113E-04
80	0.52E-02	0.51E-03	0.052E-04
100	0.35E-02	0.32E-03	0.034E-04

Nota. ECM de la eficiencia de extinción de nanoesferas de SiP de diámetro de 100 nm calculada con DDSCAT en comparación con la solución exacta, para diferentes valores en la fracción de porosidad y de SHPAR.

Los resultados numéricos se visualizan gráficamente en la Figura 7.32 donde se observa una tendencia de reducción en el ECM a medida que la porosidad aumenta. El valor más alto equivale a 5.19E-02 con P=0.25 y a medida que la porosidad aumenta, la aproximación del error disminuye.

Figura 7.32

Gráficas del error cuadrático medio de las nanoesferas de diámetro de 100 nm.



Nota. Ajuste lineal del resultado tomando en consideración el Diámetro de 100 nm.

7.3.3. ECM de nanoesferas de diámetro de 200 nm

A continuación se presentan los resultados numéricos del cálculo del ECM con diámetro de 200 nm, en la Tabla 7.7 donde se evalúa la calidad del ajuste de la eficiencia de extinción obtenida con DDSCAT. Para los valores de porosidad de 0.25, 0.50 y 0.75. Donde se distingue que el ECM disminuye, para todos los casos, al aumentar el número de dipolos mediante la variable SHPAR.

Tabla 7.7

ECM de las eficiencias de extinción en nanoesferas con diámetro de 200 nm.

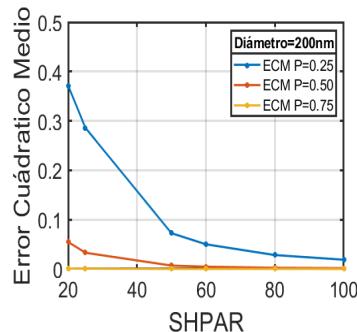
SHPAR	ECM(P=0.25)	ECM(P=0.50)	ECM(P=0.75)
20	3.715E-01	5.48E-02	8.910E-04
25	2.861E-01	3.29E-02	5.400E-04
50	0.725E-01	0.69E-02	1.220E-04
60	0.500E-01	0.46E-02	0.826E-04
80	0.282E-01	0.25E-02	0.440E-04
100	0.188E-01	0.16E-02	0.286E-04

Nota. ECM de la eficiencia de extinción de nanoesferas de SiP de diámetro de 200 nm calculada con DDSCAT en comparación con la solución exacta, para diferentes valores en la fracción de porosidad y de la variable SHPAR.

En la Figura 7.33 se grafica el ECM de la Tabla 7.7 donde se aprecia el comportamiento descendiente del ECM al aumentar el número de dipolos, en la nanoesfera de SiP y resalta el valor grande del ECM, cuando la fracción de porosidad es pequeña P=0.25, en comparación con las fracciones de porosidad de 0.50 y 0.75, esto es atribuido a que el índice de refracción del SiP a baja porosidad cambia abruptamente, ver Figura 5.23, influyendo en la solución aproximada con DDSCAT.

Figura 7.33

Gráficas del error cuadrático medio de las nanoesferas de diámetro de 200 nm.



Nota. Se muestran las 3 fracciones de porosidad, en línea color azul P=0.25, en color rojo P=0.50, y la línea color amarillo representa a la fracción de porosidad P=0.75.

7.3.4. Análisis de resultados

De los resultados en esta sección se encontró que el error cuadrático medio es menor para nanoesferas de tamaño igual a 50 nm, en comparación con nanoesferas de tamaño mayor o igual a 100 nm, este comportamiento aplica en todos los casos al aumentar el número de puntos de la discretización de la nanoesfera de SiP. De manera simultánea se concluye que el ECM es mayor cuando la nanoesfera de SiP tiene una fracción de porosidad pequeña en comparación con las nanoesferas con una fracción de porosidad grande, esto es debido a que, el índice de refracción del SiP cambia abruptamente en el intervalo de longitudes de onda considerada (350-750 nm).

7.4. Estudio de convergencia para tres longitudes de onda de prueba

En la sección anterior, se presentaron resultados de la desviación de las eficiencias de extinción en el intervalo de 350 nm-750 nm, mediante el cálculo del error cuadrático medio, en esta sección se eligen tres longitudes de onda de prueba para hacer el análisis más detallado de la convergencia de las eficiencias ópticas calculadas con DDSCAT en función del número de puntos polarizables en la discretización de la geometría dada por la variable SHPAR, con valores de 20, 25, 50, 60, 80 y 100. Específicamente se calculará la diferencia entre la eficiencia de extinción obtenida con la Teoría de Mie, $Q_{\text{ext}}^{\text{Mie}}$, y la calculada con DDSCAT, $Q_{\text{ext}}^{\text{DDA}}$, es decir,

$$\Delta Q_i = |Q_{\text{ext}}^{\text{Mie}}(\lambda_i) - Q_{\text{ext}}^{\text{DDA}}(\lambda_i)|, \quad (7.29)$$

donde lambda (λ_i) son las longitudes de onda de prueba, corresponden a: $\lambda_1=350$ nm, $\lambda_2=500$ nm, y $\lambda_3=650$ nm, se seleccionaron estas longitudes de onda en consideración a la respuesta óptica, esto iniciando en parte del intervalo de la región ultravioleta y visible. Las fracciones de porosidad consideradas son P=0.25, 0.50 y 0.75.

7.4.1. Convergencia de nanoesferas de diámetro de 50 nm

En la Tabla 7.8 se presentan las diferencias de las eficiencias de extinción con valores numéricos que se pueden visualizar en la Figura 7.34. Como se puede percibir en P=0.25, la precisión es en la primera cifra decimal para todas las longitudes de onda; la mejora en la precisión a nivel de la segunda cifra decimal se manifiesta con el valor de SHPAR=25 que corresponde a 8217 dipolos discretos; Posteriormente, la precisión avanza a la tercera cifra decimal cuando se encuentra en $\lambda_2=500$ con

un total de 65752 dipolos, cantidad que corresponde a SHPAR=50, mantenido la mejora a partir de 65752 dipolos en adelante, esta precisión se mantiene hasta que se alcanza la cuarta cifra decimal para $\lambda_3=650$ con un valor igual o superior de SHPAR=80 que corresponde a 113104 dipolos. Con relación a $P=0.50$, la precisión en la primera cifra decimal se logra para todas las longitudes de onda, Sin embargo, para alcanzar la precisión en la tercera cifra decimal, es necesario tomar en consideración ΔQ_2 y ΔQ_3 .

Finalmente, al considerar el parámetro de $P=0.75$, se observa que la precisión en la segunda cifra decimal se logra cuando se alcanza o supera el valor de SHPAR=50 en ΔQ_2 . Asimismo, la precisión en la cuarta cifra decimal se alcanza a partir de SHPAR=50 a partir de ΔQ_2 en adelante y se cumple en todas para ΔQ_3 .

Tabla 7.8

Valores numéricos del estudio de convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 50 nm, para tres longitudes de onda de prueba.

SHPAR	$P = 0.25$			$P = 0.50$			$P = 0.75$		
	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3
20	0.0116	0.0012	0.0003	0.0320	0.0006	0.0002	0.0176	0.0001	0.0000
25	0.0054	0.0009	0.0002	0.0262	0.0005	0.0001	0.0141	0.0001	0.0000
50	0.0019	0.0005	0.0001	0.0155	0.0002	0.0001	0.0078	0.0000	0.0000
60	0.0023	0.0005	0.0001	0.0130	0.0002	0.0001	0.0065	0.0000	0.0000
80	0.0020	0.0003	0.0000	0.0098	0.0001	0.0000	0.0048	0.0000	0.0000
100	0.0024	0.0003	0.0000	0.0080	0.0001	0.0000	0.0039	0.0000	0.0000

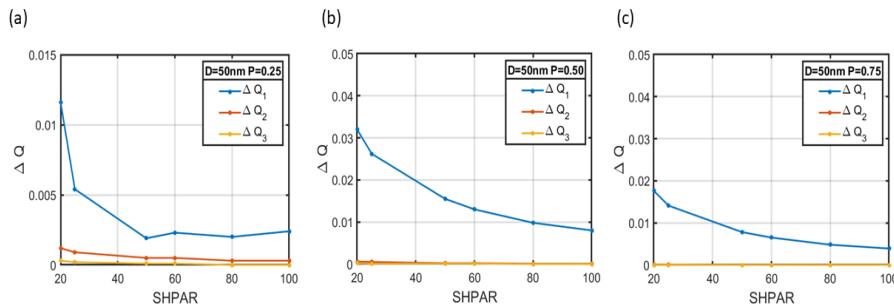
Nota. El valor de $Q_{ext}^{Mie} - Q_{ext}^{DDA}$ en $\lambda = 350$ corresponde a los resultados en ΔQ_1 , $Q_{ext}^{Mie} - Q_{ext}^{DDA}$ en $\lambda = 500$ se muestran en ΔQ_2 y $Q_{ext}^{Mie} - Q_{ext}^{DDA}$ en $\lambda = 650$ lo representa ΔQ_3 para cada porosidad, para $D = 200$ nm

En las gráficas de la Figura 7.34, se puede visualizar el comportamiento general decreciente de ΔQ_i , al aumentar la fracción de porosidad y el tamaño de la discretización mediante la variable SHPAR. Al tener valores grandes de SHPAR el error tiende a cero.

Es fundamental observar que la escala para $P=0.25$ de la Figura 7.34 (a) es diferente a la presentada en las Figuras 7.35(a) y 7.36 (a); indicando un error menor con porosidad baja, caso diferente a las nanoesferas de mayor tamaño, de 100 y 200 nm de diámetro, en las cuales el error en la eficiencia de extinción es menor cuando tienen porosidad alta.

Figura 7.34

Convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 50 nm, para tres longitudes de onda de prueba.



Nota. a) $P=0.25$ escala de 0-0.015, b) $P=0.50$ en escala de 0-0.05 al igual que c) 0.75. En longitudes de onda: $\lambda_1=350$ nm (línea color azul), $\lambda_2=500$ nm (línea color rojo), y $\lambda_3=650$ nm (línea color amarillo).

7.4.2. Convergencia de nanoesferas de diámetro de 100 nm

En la Tabla 7.9 se presentan los valores numéricos de las diferencias de las eficiencias de extinción presentados en la Figura 7.35. Se observa que para $P=0.25$, caso de la nanoesfera con porosidad baja, la precisión en la primera cifra decimal, está presente para todas las longitudes de onda de prueba, misma que se alcanza con SHPAR=80. En cuanto a $P=0.50$, la precisión en la primera cifra decimal se alcanza para todas las longitudes de onda con SHPAR=50. Por último, para $P=0.75$, la nanoesfera con porosidad más alta, la precisión en la primera cifra decimal se alcanza para todas las longitudes de onda de prueba desde SHPAR=20, y se alcanza una precisión en la segunda cifra decimal cuando SHPAR=50.

Tabla 7.9

Valores numéricos del estudio de convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 100 nm, para tres longitudes de onda de prueba.

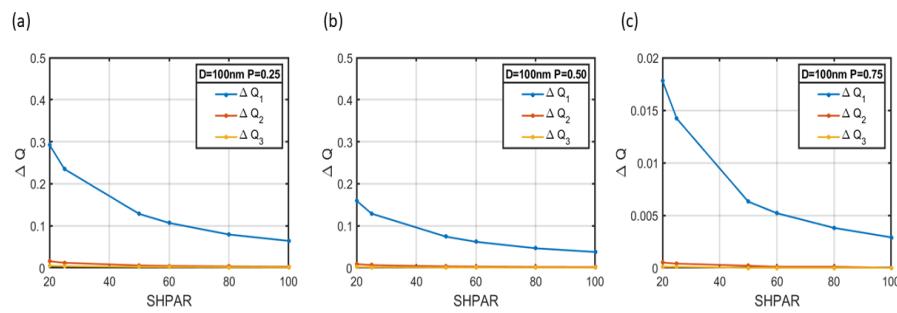
SHPAR	$P = 0.25$			$P = 0.50$			$P = 0.75$		
	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3
20	0.2927	0.0155	0.0050	0.1598	0.0089	0.0019	0.0178	0.0005	0.0001
25	0.2350	0.0120	0.0040	0.1290	0.0064	0.0015	0.0142	0.0004	0.0001
50	0.1283	0.0057	0.0022	0.0741	0.0035	0.0008	0.0063	0.0002	0.0000
60	0.1068	0.0046	0.0018	0.0619	0.0029	0.0007	0.0052	0.0001	0.0000
80	0.0793	0.0033	0.0013	0.0465	0.0021	0.0005	0.0038	0.0001	0.0000
100	0.0641	0.0026	0.0011	0.0377	0.0017	0.0004	0.0029	0.0000	0.0000

En la Figura 7.35 se grafican los valores de ΔQ_i para las nanoesferas de SiP de diámetro de 100 nm, en las longitudes de onda de prueba $\lambda_1=350$ nm, $\lambda_2=500$ nm, y $\lambda_3=650$ nm. Las fracciones de porosidad en las nanoesferas son: (a) 0.25, (b) 0.50 y (c) 0.75. De acuerdo con los resultados de la Figura 7.35, ΔQ_1 tiende a cero conforme aumenta el valor de SHPAR.

En los casos para las longitudes de onda $\lambda_2=500$ nm y $\lambda_3=650$ nm, la diferencia entre el valor obtenido con DDSCAT y el obtenido con la Teoría de Mie es prácticamente nulo para todos los valores de SHPAR considerados, y al igual que para el caso de la nanoesfera de diámetro de 200 nm, el error es menor cuando se tiene a porosidad 0.75 para las 3 longitudes de onda.

Figura 7.35

Convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 100 nm, para tres longitudes de onda de prueba.



7.4.3. Convergencia de nanoesferas de diámetro de 200 nm

En la Tabla 7.10 se muestran los valores numéricos de la diferencia entre los valores de las eficiencias de extinción, dada por la ecuación 7.29, para la nanoesfera de SP de diámetro de 200 nm, los valores de ΔQ_i tienden a cero conforme aumenta el valor de SHPAR. Para $P=0.25$, la precisión en la primera cifra decimal solo se alcanza con la longitud de onda de prueba $\lambda_1=350$ nm a partir del valor de SHPAR=80 (268096 dipolos). Para $P=0.50$, la precisión en la primera cifra decimal se alcanza para todas las longitudes de onda de prueba a partir de SHPAR=60 (1131044 dipolos). Finalmente, para $P=0.75$, cuando la nanoesfera tiene una porosidad alta, la precisión en la primera cifra decimal se alcanza para todas las longitudes de onda de prueba desde SHPAR=20 (4224 dipolos), y se alcanza una precisión en la segunda cifra decimal cuando SHPAR=100 (523984 dipolos).

Tabla 7.10

Valores numéricos del estudio de convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 200 nm, para tres longitudes de onda de prueba.

SHPAR	$P = 0.25$			$P = 0.50$			$P = 0.75$		
	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3	ΔQ_1	ΔQ_2	ΔQ_3
20	0.7201	0.9545	0.0171	0.3421	0.0160	0.0252	0.0554	0.0044	0.0016
25	0.5132	0.8801	0.0593	0.2525	0.0264	0.0198	0.0426	0.0034	0.0013
50	0.1844	0.1328	0.1215	0.1049	0.0567	0.0110	0.0187	0.0020	0.0007
60	0.1433	0.2711	0.1157	0.0843	0.0525	0.0091	0.0155	0.0017	0.0006
80	0.0978	0.3566	0.1010	0.0603	0.0412	0.0067	0.0113	0.0013	0.0004
100	0.0747	0.3577	0.1216	0.0476	0.0354	0.0054	0.0090	0.0011	0.0003

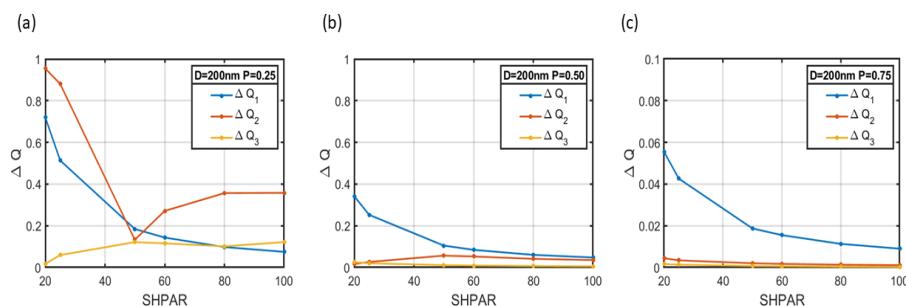
Nota. El valor de $Q_{ext}^{Mie} - Q_{ext}^{DDA}$ en $\lambda=350$ corresponde a los resultados que se visualizan en ΔQ_1 , $Q_{ext}^{Mie} - Q_{ext}^{DDA}$ en $\lambda=500$ se muestran en ΔQ_2 y $Q_{ext}^{Mie} - Q_{ext}^{DDA}$ en $\lambda=650$ lo representa ΔQ_3 en función de cada porosidad.

En la Figura 7.36 se grafican los valores de la diferencia entre los valores de las eficiencias de extinción, dada por la ecuación 7.29, para nanoesferas de SiP de diámetro de 200 nm. Se puede observar un comportamiento general decreciente de ΔQ_i cuando aumenta el número de dipolos en la discretización dado por la variable SHPAR y para valores grandes de SHPAR el error tiende a cero.

Es importante notar que esto no se cumple cuando la fracción de porosidad es igual a 0.25 con la longitud de onda de prueba $\lambda_2=500$ nm, Figura 7.36 (a), esto es debido a que coincide con la longitud de onda de resonancia, tal como se muestra en la Figura 6.24 (c). Nótese también que para una fracción de porosidad alta, Figura 7.36 (c), el error es menor para todas las longitudes de onda, resultado exhibido por el cambio en la escala del eje "Y".

Figura 7.36

Convergencia de Q_{ext} de la nanoesfera de SiP de diámetro de 200 nm, para tres longitudes de onda de prueba.



Nota. (a) $P=0.25$, (b) $P=0.50$, y (c) 0.75. Las longitudes de onda de prueba son: $\lambda_1=350$ nm (línea color azul), $\lambda_2=500$ nm (línea color rojo), y $\lambda_3=650$ nm (línea color amarillo).

7.4.4. Análisis de resultados

En esta sección se estudió la convergencia numérica de DDSCAT en tres longitudes de onda de prueba, estas son: $\lambda_1=350$ nm, $\lambda_2=500$ nm y $\lambda_3=650$ nm. De los resultados obtenidos se encuentra de manera general que el valor absoluto de la diferencia de la solución obtenida con DDSCAT en comparación con la obtenida con la Teoría de Mie decrece al incrementar el número de puntos de la discretización para construir la geometría, a excepción del caso del tamaño de nanoesfera de 200 nm con $P=0.25$ en $\lambda_2=500$ nm y en $\lambda_3=650$ nm en las cuales el comportamiento se ve afectado, ya que a estas longitudes de onda se tiene un comportamiento resonante indicado por los picos en las eficiencias de extinción presentadas en la Figura 7.30(c).

Se observa que la precisión de DDSCAT es mejor cuando se tiene una fracción de porosidad alta, se aprecia al comparar el eje vertical de la Figura 7.36(c) con (a) y (b), lo mismo para las Figuras 7.35 y 7.34, así como en las Tablas 7.10, 7.9 y 7.8, que presentan valores cercanos a cero para altas porosidades. Este resultado se puede entender a partir de las gráficas del índice de refracción del Silicio Poroso obtenido con el modelo de Bruggeman presentado en la Figura 5.23, el cual muestra un comportamiento suave del índice de refracción a altas porosidades en comparación con el índice de refracción a baja porosidad, el cual cambia abruptamente. Este cambio abrupto no permite una convergencia rápida con DDSCAT.

Finalmente, se observa que al aumentar el tamaño de la nanoesfera, y dejando fijo el número de dipolos discretos, la precisión aumenta.

CAPÍTULO VIII

CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES Y

APORTACIÓN

8.1. Conclusiones

Esta tesis se centró en el estudio de la convergencia numérica de las eficiencias ópticas usando el método de la Aproximación de Dipolo Discreto en la implementación de DDSCAT versión 7.0.3 para una nanoesfera de Silicio Poroso considerando diámetros de la nanoesfera de 50, 100 y 200 nm, además valores en la fracción de porosidad de 0.25, 0.50 y 0.75. El índice de refracción del Silicio Poroso se obtuvo a través del modelo de Bruggeman, sección 5.3, y los resultados de las eficiencias se compararon con la solución exacta proporcionada por la Teoría de Mie, sección 3.2.

De los resultados cualitativos presentados en la sección 7.2 se puede llegar a la conclusión de que para nanoesferas de 50 nm se requiere un número menor de dipolos para lograr la convergencia numérica en comparación con las nanoesferas de 100 y 200 nm de diámetro, ya que las nanoesferas grandes necesitan una cantidad significativamente mayor de dipolos para acercarse a la solución exacta proporcionada por la Teoría de Mie. Por otro lado, fijando el tamaño de la nanoesfera y variando la fracción de porosidad, se encontró que la nanoesfera de SP con una porosidad baja requiere de un número más elevado de dipolos para alcanzar la convergencia en comparación con las esferas con fracción de porosidad alta. Esto debido a los picos abruptos en el índice de refracción del SP a baja porosidad, en el rango de longitudes de onda considerado, tal como se muestra en la Figura 5.23.

Se realizó un estudio de la desviación de la solución dada por DDSCAT en comparación con la Teoría de Mie por medio cuantitativo del cálculo del Error Cuadrático Medio (ECM) sección 7.3. De los resultados se puede inferir que la desviación de la solución con DDSCAT se aproxima mejor para las esferas de menor tamaño en comparación con las esferas de mayor tamaño, resultado que concuerda con el análisis cualitativo de la sección 7.2. Además, en todos los escenarios, el ECM disminuye a medida que aumenta el número de puntos utilizados en la discretización de la nanoesfera de SP, este resultado concuerda con lo reportado por Draine *et al.* ([draine2013user](#)).

Respecto a la porosidad de las nanoesferas se encontró en la sección 7.3 que el ECM es mayor para cálculos con baja porosidad en comparación con aquellas nanoesferas que tienen una alta porosidad, resultado que concuerda con lo visto cualitativamente en la sección 7.2.

En la sección 7.4, se examinó la convergencia numérica de DDSCAT en tres longitudes de onda de prueba: $\lambda_1=350$ nm, $\lambda_2=500$ nm y $\lambda_3=650$ nm. Se observó que el valor absoluto de la diferencia entre la solución obtenida con DDSCAT y la obtenida con la Teoría de Mie disminuye a medida que se aumenta el número dipolos, con excepción de los casos en los que el tamaño de la nanoesfera es de 200 nm con $P=0.25$ en $\lambda_2=500$ nm y en $\lambda_3=650$ nm. En estas longitudes de onda, se produce un

comportamiento resonante. Se observó es que la precisión de DDSCAT es mayor cuando la fracción de porosidad es alta en comparación con la nanoesfera con porosidad baja. Esta observación se puede entender debido al comportamiento abrupto del índice de refracción del SP para bajas porosidades. El cambio abrupto en el índice de refracción dificulta la convergencia rápida de DDSCAT.

Finalmente, este estudio no solo revela las complejidades y relaciones de las propiedades ópticas de nanoesferas de SP con la fracción de porosidad y el tamaño, sino que también demuestra el que el método de DDA en su implementación de DDSCAT versión 7.0.3 es efectivo para el cálculo de las eficiencias ópticas con los valores apropiados en el número de dipolos para la construcción de la geometría.

Se espera que los resultados de la presente investigación sirvan como base para otros estudios que involucren un mayor número de nanopartículas de Silicio Poroso.

8.2. Recomendaciones

1. Continuar con estudios teóricos de las propiedades ópticas de nanoesferas de Silicio Poroso utilizando mayor número de esferas con la finalidad de realizar una propuesta de un substrato para microscopía SERS.
2. Realizar experimentalmente nanoesferas de Silicio Poroso para comprobar las mediciones aquí presentadas.
3. Continuar con proyectos de investigación que involucren a estudiantes de la carrera de ingeniería en sistemas como una alternativa viable de titulación, esto posiblemente favorezca en la transición hacia un posgrado.

8.3. Aportación

1. Se encontraron valores óptimos en la discretización de la geometría para obtener valores confiables de las eficiencias ópticas de nanoesferas de Silicio Poroso utilizando el método de DDA en la implementación de DDSCAT.
2. Se implementó el código de DDSCAT en los servidores del Laboratorio de Supercómputo de propiedades Físicas y Químicas del ITSSMT.

Glosario

Aproximación de Dipolo Discreto: El método propone modelar el objeto dispersor o blanco como un arreglo discreto de N dipolos, entre mayor sea el número de dipolos que representa a la superficie del objeto sólido, mayor es la exactitud.

Convergencia: Aspecto esencial en cualquier estudio que involucre simulaciones o métodos numéricos, se refiere a que los resultados de un cálculo se acerquen cada vez más a un valor preciso a medida que se refinan los parámetros.

Ecuaciones de Maxwell: Expresiones matemáticas que logran unificar los fenómenos eléctricos y magnéticos en uno solo llamado “electromagnetismo”.

Interpolación: Proceso matemático y numérico que se utiliza para estimar valores intermedios dentro de un conjunto de datos conocidos o puntos de referencia.

Longitud de onda: La longitud de onda (λ , “lambda”) es una característica de una onda y se puede definir como la distancia que hay entre las dos crestas de la onda.

Modelo de Bruggeman: Es un enfoque matemático utilizado para describir el comportamiento óptico de materiales compuestos, especialmente aquellos que consisten en una mezcla de componentes con diferentes propiedades ópticas, proporciona estimaciones efectivas de las propiedades ópticas del material compuesto, teniendo en cuenta la distribución y la interacción de los diferentes componentes.

Qabs: Explica la absorción de partículas, es decir, la transformación de energía electromagnética dentro de otra forma.

Qsca: Explica la dispersión de partículas dentro de otra forma.

Qext: La extinción depende de la composición química, tamaño, forma, orientación, medio circundante, número de partículas y estado de polarización.

SHPAR: “Shape-Parameter” es una característica importante en la simulación de dispersión de dipolos discretos y se utiliza para describir la forma y la geometría de las partículas que se están modelando en el algoritmo DDA.

Teoría de Mie: Se basa en las ecuaciones de Maxwell, para obtener la ecuación de onda vectorial en coordenadas esféricas. Haciendo uso de la separación de variables, se puede expresar la solución de los campos eléctrico y magnético de la onda incidente en forma de funciones matemáticas. Para el campo de dispersión a distancia de la esfera, absorción y la sección de extinción determinada en función de una serie infinita.