

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERIA
FACULTAD DE CIENCIAS



Topicos de Investigación II Report: *Simulación de Resonancias Opticas mediante el análisis de Mie y su aplicación para la determinación del tamaño de micropartículas esféricas.*

Asesor: Dr. Javier Solano Salinas

Leonel Máximo PAURO VELASQUEZ

9 de julio de 2010

Resumen

En este trabajo se introduce el concepto de scattering de Mie. El análisis se lleva a cabo en Electrodinámica Clásica derivandose las correspondientes ecuaciones. Se hicieron cálculos del factor Q_{ext} para un rango de valores del parámetro de tamaño q . Para esto se adaptó a Matlab 7 el programa `bhmie` del libro de Bohren y Huffman [4], originalmente escrito en Fortran. Como aplicación final de estos cálculos se muestra una “posible” utilidad en la determinación del tamaño de partículas microscópicas.

Índice general

1. Introduction	2
2. Marco Teórico	3
2.1. Resolviendo la ecuación de onda.	6
2.2. Expansión de una onda plana en armónicos esféricos vectoriales	9
2.3. Los campos Interno y Dispersado	10
2.4. Los coeficientes de Scattering	12
2.5. La eficiencia de Extinción	12
2.6. El Experimento de Levitación Óptica.	13
3. La Simulación de Resonancias Ópticas.	16
3.1. Conclusiones	19

Capítulo 1

Introduction

En 1908 el físico alemán Gustav Mie publicó su famoso artículo sobre la simulación de los efectos del color relacionados a las partículas coloidales de oro. Este trabajo ha sido citado en casi todos los textos sobre aerosoles y ciencias atmosféricas [8]. Mie desarrolló, en base al electromagnetismo clásico, una solución rigurosa para el problema de la dispersión de una onda plana y monocromática por una esfera homogénea de cualquier diámetro y cualquier material.

En el presente trabajo se desarrollan las ecuaciones provenientes del análisis de Mie, y se realizarán simulaciones en computadora para aplicarlos a la determinación del tamaño de micropartículas, mostrando una nueva forma de espectroscopía.

Capítulo 2

Marco Teórico

Gracias a la formulación de las ecuaciones de Maxwell en 1861, J.J. Thomson publicó un libro de 560 páginas donde se analiza teóricamente todo tipo de problemas de electromagnetismo que se pudieran imaginar. Dentro de estos problemas, se encontraba una solución particular para la difracción de la luz por esferas perfectamente conductoras menores o comparables a la longitud de onda. Luego, en 1908, Gustav Mie publica su famoso tratado "zur *Optik trüber Medien speziell kolloidaler Goldlösungen*", donde trata el problema con mucho mayor rigurosidad y generalidad.

Friedrich Hasenöhl ya había publicado un paper en 1902 que contenía la solución completa de la posterior publicación de Mie. Usando los resultados de Hasenöhl, Ehrenhaft dio una solución más elegante pero tuvo cierto error con respecto a los cálculos de la polarización de la luz. Un tratado similar fue dado por Debye, que se considera más elegante al utilizar dos potenciales escalares[5]. El desarrollo que se presenta a continuación es el según el libro de Bohren y Huffman [4].

El Método.- Se encontrará la solución de las ecuaciones de Maxwell que describen el campo resultante de una onda plana y monocromática que incide sobre una superficie esférica. El sistema de coordenadas más apropiado es el de coordenadas esféricas. El campo eléctrico se descompone en una suma de dos *subcampos* - uno de ellos sin componente radial. Con las condiciones de contorno se produce un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias que luego son resueltas para los dos subcampos en forma de series infinitas.

Condiciones del problema:

1. Onda incidente: plana, monocromática y linealmente polarizada.
2. Radio de la esfera: a .
3. Medio: isotrópico, homogéneo, no conductor ($\sigma = 0$) y no magnético ($\mu_r = 1$).
4. Esfera no magnética ($\mu_r = 0$).

Se va a ensayar soluciones del campo electromagnético de la forma,

$$\vec{\mathbf{E}}_{(\vec{r};t)} = \vec{E}_{(\vec{r})} e^{-i\omega t} \quad (2.1)$$

$$\vec{\mathbf{H}}_{(\vec{r};t)} = \vec{H}_{(\vec{r})} e^{-i\omega t} \quad (2.2)$$

Reemplazando esto en las ecuaciones de Maxwell,

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{E}} = -\frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{B}} = \mu \vec{\mathbf{J}} + \mu \epsilon \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} \quad (2.4)$$

Se obtienen las ecuaciones independientes del tiempo:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = -k_1 \vec{E} \quad (2.5)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = k_2 \vec{H} \quad (2.6)$$

donde,

$$k_1 = i\omega \left(\epsilon + i\frac{\sigma}{\omega} \right) \quad (2.7)$$

$$k_2 = i\omega\mu \quad (2.8)$$

Ahora, fuera de la esfera: $\rho = 0$ y $\vec{J} = \vec{0}$, por consiguiente, introduciendo una de las ecuaciones de arriba en la otra obtendremos para el campo eléctrico,

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{k_2} \vec{\nabla} \times \vec{E} \right) = -k_1 \vec{E} \quad (2.9)$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \vec{\nabla}^2 \vec{E} = -k_1 k_2 \vec{E} \quad (2.10)$$

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} = k_1 k_2 \vec{E} \quad (2.11)$$

En remembranza con la ecuación de onda,

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

y la relación $c = \frac{\omega}{k}$, se tiene que el número de onda asociado cumple,

$$k^2 = -k_1 k_2 \quad (2.12)$$

Este número es real fuera de la esfera e imaginario adentro.

- ✓ A las cantidades que se refieran al medio fuera de la esfera se les denotará por el superíndice II.
- ✓ A las cantidades que se refieran al medio dentro de la esfera se les denotará por el superíndice I.

En consecuencia, $\sigma^{(II)} = 0$.

El sistema de coordenadas se sitúa de acuerdo con la figura 2.1.

En vista de las ecuaciones 2.7 y 2.8, supóngase que, dada una función escalar ψ y un vector \vec{c} constante y arbitrario, se construye la función vectorial:

$$\vec{M} = \vec{\nabla} \times (\vec{c}\psi) \quad (2.13)$$

La divergencia de rotacional de cualquier función se anula, entonces,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0 \quad (2.14)$$

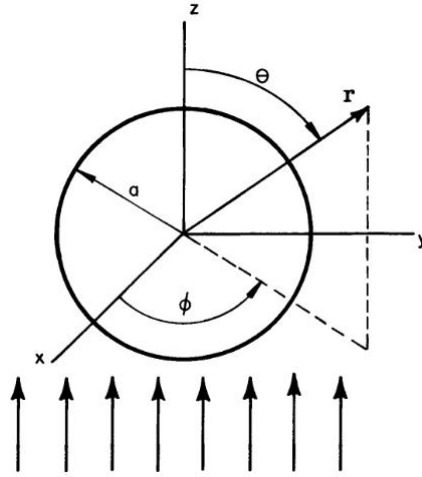


Figura 2.1: difracción por una esfera de radio a .

Utilizando las identidades vectoriales,

$$\vec{\nabla} \times (\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{A}(\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) - \vec{B}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) + (\vec{B} \cdot \vec{\nabla})\vec{A} - (\vec{A} \cdot \vec{\nabla})\vec{B} \quad (2.15)$$

$$\vec{\nabla}(\vec{A} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) + \vec{B} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) + (\vec{B} \cdot \vec{\nabla})\vec{A} + (\vec{A} \cdot \vec{\nabla})\vec{B} \quad (2.16)$$

obtenemos,

$$\nabla^2 \vec{M} + k^2 \vec{M} = \nabla \times [\vec{c}(\nabla^2 \psi + k^2 \psi)] \quad (2.17)$$

Por lo tanto, \vec{M} satisface la ecuación vectorial de onda si ψ es una solución a la ecuación escalar de onda,

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0 \quad (2.18)$$

Podríamos escribir también $\vec{M} = -\vec{c} \times \nabla \psi$, lo que muestra que \vec{M} es perpendicular a \vec{c} . Construyamos otra función vectorial a partir de \vec{M} ,

$$\vec{N} = \frac{\vec{\nabla} \times \vec{M}}{k} \quad (2.19)$$

La diferencia de este campo también se anula y asimismo satisface la ecuación de onda,

$$\nabla^2 \vec{N} + k^2 \vec{N} = 0 \quad (2.20)$$

Notese que,

$$\vec{\nabla} \times \vec{N} = k \vec{M} \quad (2.21)$$

Por lo tanto, \vec{M} y \vec{N} tienen todas las propiedades necesarias de un campo electromagnético,

- Satisfacen la ecuación de onda.
- Su divergencia se anula.
- El rotacional de una cantidad es proporcional a la otra

Luego, el problema de hallar soluciones a las ecuaciones de campo se reduce al problema - comparativamente más simple - de encontrar soluciones a la ecuación de onda escalar. A ψ usualmente se le llama la *función generatriz* de los armónicos vectoriales \vec{M} y \vec{N} ; y a \vec{c} se le

conoce como vector *guía* o *piloto*.

La elección de funciones generatrices está establecida por el tipo de simetría del problema. Como estamos tratando el problema de scattering por una esfera, escogemos funciones *psi* que satisfacen la ecuación de la onda en coordenadas polares esféricas. Para el vector piloto podríamos escoger algún vector arbitrario \vec{c} . Sin embargo, si tomamos,

$$\vec{M} = \vec{\nabla} \times (\vec{r}\psi) \quad (2.22)$$

donde \vec{r} es el radio vector, entonces \vec{M} es una solución a la ecuación de onda vectorial en coordenadas polares esféricas. En problemas que implican simetría esférica, por tanto, debemos tomar \vec{M} dado por 2.22 y el correspondiente \vec{N} como nuestras soluciones fundamentales para las ecuaciones de campo. Nótese que \vec{M} es tangencial en todo punto a cualquier esfera $|\vec{r}| = \text{constante}$.

2.1. Resolviendo la ecuación de onda.

La ecuación escalar en coordenadas polares esféricas es,

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + k^2 \psi = 0 \quad (2.23)$$

Se buscan soluciones particulares para 2.23 de la forma,

$$\psi_{(r,\theta,\phi)} = R_{(r)} \Theta_{(\theta)} \Phi_{(\phi)} \quad (2.24)$$

las cuales, sustituidas en 2.23 la separan en tres ecuaciones,

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m^2 \Phi = 0 \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0 \quad (2.26)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + [k^2 r^2 - l(l+1)] R = 0 \quad (2.27)$$

donde las constantes de separación m y n están determinadas por las condiciones de contorno que *psi* debe satisfacer. Primero notamos que si, para un m dado, Φ_m es una solución de 2.25, entonces Φ_{-m} no es una solución linealmente independiente. Las soluciones linealmente independientes son,

$$\Phi_e = \cos m\phi \quad (2.28)$$

$$\Phi_o = \sin m\phi \quad (2.29)$$

donde los subíndices *e* y *o* denotan *par* e *impar*. Ahora, se necesita que ψ sea una función que tenga sentido desde el punto de vista de la física,

$$\lim_{\infty \rightarrow 2\pi} \psi_{(\phi+\nu)} = \psi_{(\phi)} \quad (2.30)$$

para todo ϕ excepto, posiblemente en puntos en los contornos entre regiones con diferentes propiedades. Sin embargo, por ahora no nos interesan tales puntos; sólo estamos interesados en soluciones de la ecuación escalar de onda en los puntos interiores de regiones homogéneas. La condición 2.30 implica que m sea entera o cero. Para generar todas las soluciones linealmente independientes de 2.25 solo nos bastan los valores positivos de m .

Las soluciones de 2.26 que cumplen con ser finitas en $\theta = 0, \pi$ son los *polinomios asociados de Legendre* del primer tipo $P_l^m(\cos \theta)$ de grado n y orden l , donde $n = l, l + 1, \dots$. Estas funciones son ortogonales,

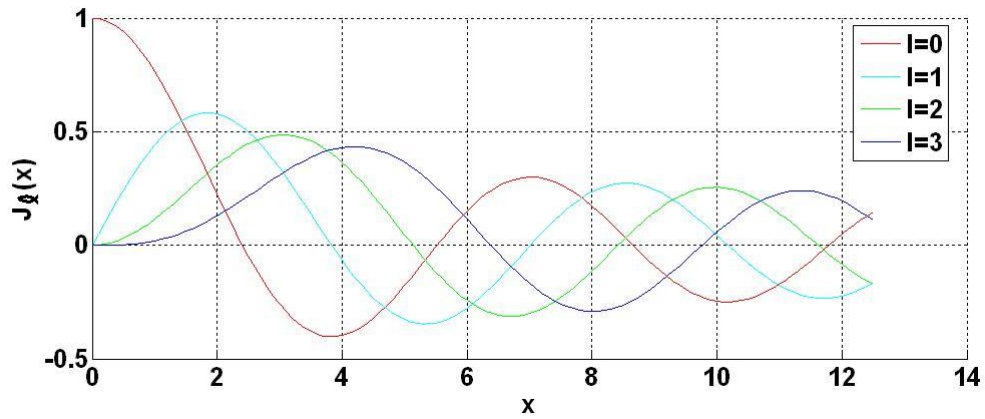
$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_l^m(x) dx = \delta_{ll} \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}, \quad (2.31)$$

donde $x = \cos \theta$.

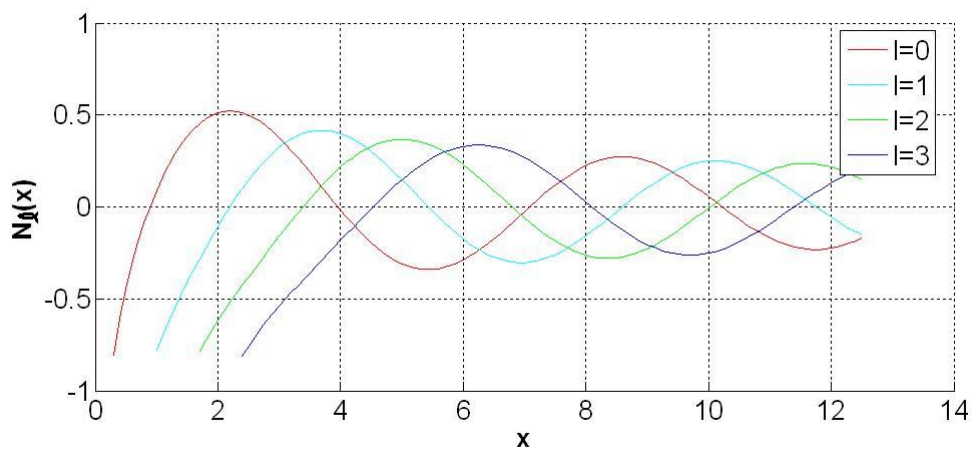
Si introducimos la variable adimensional $\rho = kr$ y definimos la función $Z = R\sqrt{\rho}$, 2.27 se vuelve,

$$\rho \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dZ}{d\rho} \right) + \left[\rho^2 - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right] Z = 0 \quad (2.32)$$

Las soluciones linealmente independientes de 2.32 son las *funciones de Bessel* de primer y segundo tipo J_ν y N_ν , donde el orden $\nu = l + \frac{1}{2}$ es un semi-entero. Estas funciones se muestran en la figura 2.2.



(a)



(b)

Figura 2.2:

Por lo tanto, las soluciones linealmente independientes de 2.27 son las *funciones esféricas de Bessel*,

$$j_l = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{l+1/2}(\rho), \quad (2.33)$$

$$n_l = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} N_{l+1/2}(\rho), \quad (2.34)$$

Cualquier combinación lineal de j_l y n_l es una solución de 2.27. Luego podríamos tomar la siguientes combinaciones como soluciones fundamentales,

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + m_l(\rho) \quad (2.35)$$

$$h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - m_l(\rho) \quad (2.36)$$

que son conocidas como las *funciones esféricas de Hankel*. Ahora contamos con las siguientes funciones base que satisfacen la ecuación de onda en coordenadas esféricas,

$$\psi_{eml} = \cos m\phi P_l^m(\cos\theta) z_l(kr), \quad (2.37)$$

$$\psi_{oml} = \sin m\phi P_l^m(\cos\theta) z_l(kr), \quad (2.38)$$

donde z_l es cualquiera de las funciones esféricas de Bessel $j_l, n_l, h_l^{(1)}$ o $h_l^{(2)}$. Además, debido a la *completitud* de las funciones $\cos m\phi, \sin m\phi, P_l^m(\cos\theta), z_l(kr)$, cualquier función que satisfaga la ecuación escalar de onda en coordenadas polares esféricas puede ser expandida como una serie infinita de las funciones 2.37 y 2.38. Los “armónicos esféricos vectoriales” generados por ψ_{eml} y ψ_{oml} son,

$$\vec{M}_{eml} = \vec{\nabla} \times (\vec{r}\psi_{eml}) \quad (2.39)$$

$$\vec{M}_{oml} = \vec{\nabla} \times (\vec{r}\psi_{oml}) \quad (2.40)$$

$$\vec{N}_{eml} = \frac{\vec{\nabla} \times \vec{M}_{eml}}{k} \quad (2.41)$$

$$\vec{N}_{oml} = \frac{\vec{\nabla} \times \vec{M}_{oml}}{k} \quad (2.42)$$

las cuales, en forma de componentes vectoriales, se escriben como,

$$\vec{M}_{eml} = \frac{-m}{\sin\theta} \sin m\phi P_l^m(\cos\theta) z_l(\rho) \hat{e}_\theta - \cos m\phi \frac{dP_l^m(\cos m\theta)}{d\theta} z_l(\rho) \hat{e}_\phi \quad (2.43)$$

$$\vec{M}_{oml} = \frac{m}{\sin\theta} \cos m\phi P_l^m(\cos\theta) z_l(\rho) \hat{e}_\theta - \sin m\phi \frac{dP_l^m(\cos m\theta)}{d\theta} z_l(\rho) \hat{e}_\phi \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} \vec{N}_{eml} = & \frac{z_l(\rho)}{\rho} \cos m\phi l(l+1) P_l^m(\cos\theta) \hat{e}_r + \cos m\phi \frac{dP_l^m(\cos m\theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_l(\rho)] \hat{e}_\theta \\ & - m \sin m\phi \frac{P_l^m(\cos m\theta)}{\sin\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_l(\rho)] \hat{e}_\phi \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \vec{N}_{oml} = & \frac{z_l(\rho)}{\rho} \sin m\phi l(l+1) P_l^m(\cos\theta) \hat{e}_r + \sin m\phi \frac{dP_l^m(\cos m\theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_l(\rho)] \hat{e}_\theta \\ & + m \cos m\phi \frac{P_l^m(\cos m\theta)}{\sin\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_l(\rho)] \hat{e}_\phi \end{aligned} \quad (2.46)$$

donde la componente radial de \vec{N}_{ml} ha sido simplificada usando el hecho de que P_l^m satisface 2.26. Ahora, cualquier solución de las ecuaciones de campo se puede expandir en una serie infinita de las funciones de arriba.

2.2. Expansión de una onda plana en armónicos esféricos vectoriales

El problema que se está tratando es el del scattering de una onda plana linealmente polarizada en el eje X , escrita en coordenadas polares como,

$$\vec{E}_i = E_0 e^{i k r \cos \theta} \hat{e}_x \quad (2.47)$$

donde,

$$\hat{e}_x = \sin \theta \cos \phi \hat{e}_r + \cos \theta \cos \phi \hat{e}_\theta - \sin \phi \hat{e}_\phi, \quad (2.48)$$

para una esfera arbitraria. El primer paso para encontrar la solución es expandir 2.47 en armónicos esféricos vectoriales,

$$\vec{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \left(B_{eml} \vec{M}_{eml} + B_{oml} \vec{M}_{oml} + A_{eml} \vec{N}_{eml} + A_{oml} \vec{N}_{oml} \right) \quad (2.49)$$

Debido a que $\sin m\phi$ es ortogonal a $\cos m'\phi$ para todo m y m' se sigue que \vec{M}_{eml} y \vec{M}_{oml} son ortogonal en el sentido que,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{M}_{em'l'} \cdot \vec{M}_{oml} \sin \theta d\theta d\phi = 0 \quad (\text{para todo } m, m', l, l') \quad (2.50)$$

Similarmente, $(\vec{N}_{oml}, \vec{N}_{eml})$, $(\vec{M}_{oml}, \vec{N}_{oml})$ y $(\vec{M}_{eml}, \vec{N}_{eml})$ son conjuntos de funciones mutuamente ortogonales. Las propiedades de ortogonalidad de $\cos m\phi$ y $\sin m\phi$ implican que todos los armónicos vectoriales de diferente orden m son mutuamente ortogonales.

Para probar que las funciones $(\vec{M}_{eml}, \vec{N}_{oml})$ y $(\vec{M}_{oml}, \vec{N}_{eml})$ son ortogonales, debemos probar que la integral,

$$m \int_0^\pi \left(P_l^m \frac{dP_{l'}^m}{d\theta} + P_{l'}^m \frac{dP_l^m}{d\theta} \right) d\theta = P_l^m P_{l'}^m \Big|_0^\pi \quad (2.51)$$

se anula para todo l y l' . Recordando que,

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(x)}{dx^m} \quad (2.52)$$

donde $x = \cos \theta$, de lo cual se sigue que P_l^m se anula para $\theta = 0, \pi$ excepto cuando $m = 0$. Por lo tanto, 2.51 se anula para todo m, l y l' .

La prueba de las siguientes relaciones de ortogonalidad,

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{M}_{em'l'} \cdot \vec{M}_{eml} \sin \theta d\theta d\phi &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{M}_{om'l'} \cdot \vec{M}_{oml} \sin \theta d\theta d\phi = 0 \\ \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{N}_{em'l'} \cdot \vec{N}_{eml} \sin \theta d\theta d\phi &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{N}_{om'l'} \cdot \vec{N}_{oml} \sin \theta d\theta d\phi = 0 \end{aligned}$$

donde $l \neq l'$ y $m \neq 0$, requiere que se muestre que,

$$\int_0^\pi \left[\frac{dP_l^m}{d\theta} \frac{dP_{l'}^m}{d\theta} + m^2 \frac{P_l^m P_{l'}^m}{\sin^2 \theta} \right] \sin \theta d\theta = 0 \quad (2.53)$$

Debido a que tanto P_l^m como $P_{l'}^m$ satisfacen 2.26, se tiene que,

$$2 \sin \theta \left[\frac{dP_l^m}{d\theta} \frac{dP_{l'}^m}{d\theta} + m^2 \frac{P_l^m P_{l'}^m}{\sin^2 \theta} \right] = 2l(l+1) P_l^m P_{l'}^m \sin \theta + \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{dP_{l'}^m}{d\theta} P_l^m + \sin \theta \frac{dP_l^m}{d\theta} P_{l'}^m \right] \quad (2.54)$$

ésta, junto con las relaciones de ortogonalidad 2.31, conllevan al cumplimiento de 2.53. Cuando $m = 0$, \vec{N}_{oml} y \vec{M}_{oml} se anulan; la ortogonalidad de \vec{M}_{eml} y \vec{N}_{eml} cuando $m = 0$ también resulta de 2.53 y 2.54.

La ortogonalidad de todos los armónicos esféricos vectoriales así demostrada, implica que los coeficientes en la expansión 2.49 sean de la forma,

$$B_{eml} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \vec{E}_i \cdot \vec{M}_{eml} \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\vec{M}_{eml}|^2 \sin \theta d\theta d\phi} \quad (2.55)$$

con expresiones similares para B_{oml} , A_{eml} y A_{oml} . Se sigue de 2.43, 2.46 y 2.48, junto con la ortogonalidad del seno y el coseno, que $B_{eml} = A_{oml} = 0$ para todo m y l . Adicionalmente, los demás coeficientes se anulan excepto para $m = 1$ por la misma razón. El campo incidente es finito en el origen, lo que requiere que $j_l(kr)$ sea la función esférica de Bessel apropiada expresada en términos de ψ_{o1l} y ψ_{e1l} ; despreciamos n_l debido a su singularidad en el origen. Se denotará con el superíndice (1) a los armónicos esféricos vectoriales para los cuales la dependencia radial de las funciones base está dada por j_l . Así, \vec{E}_i se expande como,

$$\vec{E}_i = \sum_{l=1}^{\infty} (B_{o1l} \vec{M}_{o1l}^{(1)} + A_{e1l} \vec{N}_{e1l}^{(1)}) \quad (2.56)$$

Luego de un poco de algebra y utilizando las identidades de los polinomios de Legendre se llega a,

$$\vec{E}_i = E_0 \sum_{l=1}^{\infty} \nu^l \frac{2l+1}{l(l+1)} (\vec{M}_{o1l}^{(1)} - \nu \vec{N}_{e1l}^{(1)}) \quad (2.57)$$

2.3. Los campos Interno y Dispersado

Supóngase que una onda plana linealmente polarizada en el eje X incide sobre una esfera homogénea e isotrópica de radio a . Como se demostró en la sección anterior, el campo eléctrico incidente puede ser expandido en una serie infinita de armónicos esféricos vectoriales. El campo magnético correspondiente se obtiene de 2.57,

$$\vec{H}_i = -\frac{k}{\omega\mu} E_0 \sum_{l=1}^{\infty} \nu^l \frac{2l+1}{l(l+1)} (\vec{M}_{e1l}^{(1)} + \nu \vec{N}_{o1l}^{(1)}) \quad (2.58)$$

Podemos expandir, de igual forma, el campo electromagnético dispersado ($\vec{E}_S; \vec{H}_S$) y el campo ($\vec{E}_I; \vec{H}_I$) dentro de la esfera en armónicos esféricos vectoriales. En el límite entre la esfera y el medio circundante, se tienen las siguientes condiciones de contorno,

$$(\vec{E}_i + \vec{E}_S - \vec{E}_I) \times \hat{e}_r = (\vec{H}_i + \vec{H}_S - \vec{H}_I) \times \hat{e}_r = 0 \quad (2.59)$$

Las condiciones de contorno 2.59, la ortogonalidad de los armónicos vectoriales, y la forma de la expansión del campo incidente determinan la forma de las expansiones para el campo dispersado y el campo dentro de la esfera: Los coeficientes para estas expansiones se anulan para todo $m \neq 1$. Para que las soluciones sean finitas en el origen debemos tomar $j_l(k_1 r)$, donde k_1 es el número de onda dentro de la esfera, como las funciones esféricas de Bessel apropiadas

para conformar las funciones base de los armónicos vectoriales dentro de la esfera. Luego, la expansión del campo $(\vec{E}_I; \vec{H}_I)$ es

$$\vec{E}_I = \sum_{l=1}^{\infty} E_l (c_l \vec{M}_{o1l}^{(1)} - \imath d_l \vec{N}_{e1l}^{(1)}) \quad (2.60)$$

$$\vec{H}_I = -\frac{k_1}{\omega \mu_1} \sum_{l=1}^{\infty} E_l (d_l \vec{M}_{e1l}^{(1)} + \imath c_l \vec{N}_{o1l}^{(1)})$$

donde $E_l = \imath^l E_0 (2l+1)/l(l+1)$ y μ_1 es la permeabilidad de la esfera.

En la región fuera de la esfera j_l y n_l se comportan bien; por lo tanto, la expansión del campo dispersado implica a ambas funciones. Sin embargo, es conveniente referirnos ahora a ellas mediante las funciones de Hankel $h_l^{(1)}$ y $h_l^{(2)}$. Se puede demostrar que sólo una de estas funciones se requiere considerando las expansiones asintóticas de las funciones de Hankel de orden ν para grandes valores de $|\rho|$,

$$H_\nu^{(1)}(\rho) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\rho}} e^{\imath[\rho - \nu\pi/2 - \pi/4]} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (\nu, m)}{(2\imath\rho)^m} \quad (2.61)$$

$$H_\nu^{(2)}(\rho) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\rho}} e^{-\imath[\rho - \nu\pi/2 - \pi/4]} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\nu, m)}{(2\imath\rho)^m} \quad (2.62)$$

donde

$$(\nu, m) = \frac{\Gamma(\nu + m + 1/2)}{m! \Gamma(\nu - m + 1/2)} \quad (2.63)$$

Se sigue de 2.61 que las funciones esféricas de Hankel están dadas de forma asintótica (para $kr \gg n^2$) por,

$$h_l^{(1)} \sim \frac{(-\imath)^l e^{\imath kr}}{\imath kr} \quad (2.64)$$

$$h_l^{(2)} \sim -\frac{(\imath)^l e^{\imath kr}}{\imath kr} \quad (2.65)$$

La primera de estas expresiones corresponde a una onda esférica *saliente*; la segunda, a una onda esférica *entrante*. Si, basados en argumentos físicos, el campo dispersado se toma como una onda saliente a grandes distancias de la partícula, entonces solo deberíamos usar $h_l^{(1)}$ para las funciones base. Al considerar el campo dispersado a grandes distancias también es necesaria la expresión asintótica para la derivada de $h_l^{(1)}$; de la identidad,

$$\frac{dz_l}{d\rho} = \frac{lz_{l-1} - (l+1)z_{l+1}}{2l+1} \quad (2.66)$$

y de 2.64 se obtiene,

$$\frac{dh_l^{(1)}}{d\rho} \sim \frac{(-\imath)^l e^{\imath\rho}}{\rho} \quad (\rho \gg n^2) \quad (2.67)$$

La expansión para el campo dispersado es por tanto,

$$\vec{E}_S = \sum_{l=1}^{\infty} E_l (\imath a_l \vec{N}_{e1l}^{(3)} - b_l \vec{M}_{o1l}^{(3)}) \quad (2.68)$$

$$\vec{H}_S = \frac{k}{\omega \mu} \sum_{l=1}^{\infty} E_l (\imath b_l \vec{N}_{o1l}^{(3)} + a_l \vec{M}_{e1l}^{(3)})$$

donde el superíndice (3) denota los armónicos esféricos vectoriales cuyas funciones base estan especificados por $h_l^{(1)}$.

2.4. Los coeficientes de Scattering

Para poder hacer cálculos numéricos de las cantidades que nos interesan conocer, como es la eficiencia de extinsión, es necesario obtener expresiones analíticas para los coeficientes de scattering a_l y b_l .

Para un l dado, se tienen cuatro coeficientes a_l, b_L, c_l y d_l ; así, necesitamos 4 ecuaciones independientes las cuales se obtienen de las condiciones de contorno 2.59 para cada componente ($r=a$),

$$E_{i\theta} + E_{S\theta} = E_{I\theta} \quad (2.69)$$

$$E_{i\phi} + E_{S\phi} = E_{I\phi} \quad (2.70)$$

$$H_{i\theta} + H_{S\theta} = H_{I\theta} \quad (2.71)$$

$$H_{i\phi} + H_{S\phi} = E_{I\phi} \quad (2.72)$$

estas condiciones junto con la ortogonalidad de $\sin m\phi$ y $\cos m\phi$ y las expansiones 2.57, 2.58, 2.60 y 2.68 nos dan las cuatro ecuaciones lineales para los coeficientes que buscamos,

$$j_l(mx)c_l + h_l^{(1)}b_l = j_l(x) \quad (2.73)$$

$$\mu[mxj_l(mx)]'c_l + \mu_1[xh_l^{(1)}(x)]'b_l = \mu_1[xj_l(x)]' \quad (2.74)$$

$$\mu mj_l(mx)d_l + \mu_1 h_l^{(1)}(x)a_l = \mu_1 j_l(x) \quad (2.75)$$

$$[mxj_l(mx)]'d_l + m[xh_l^{(1)}(x)]'a_l = m[xj_l(x)]' \quad (2.76)$$

donde la prima indica la derivada con respecto al argumento entre paréntesis y el *parámetro de tamaño* x y el *índice de refracción relativo* m son,

$$\begin{aligned} x &= ka = \frac{2\pi Na}{\lambda} \\ m &= \frac{k_1}{k} = \frac{N_1}{N} \end{aligned}$$

N_1 y N son los índices de refracción de la partícula y el medio, respectivamente. El sistema lineal de cuatro ecuaciones se resuelve fácilmente para todos sus coeficientes,

$$c_l = \frac{\mu_1 j_l(x)[xh_l^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_l^{(1)}(x)[xj_l(x)]'}{\mu_1 j_l(mx)[xh_l^{(1)}]' - \mu h_l^{(1)}(x)[mxj_l(mx)]'} \quad (2.77)$$

$$d_l = \frac{\mu_1 m j_l(x)[xh_l^{(1)}(x)]' - \mu_1 m h_l^{(1)}(x)[xj_l(x)]'}{\mu m^2 j_l(mx)[xh_l^{(1)}]' - \mu_1 h_l^{(1)}(x)[mxj_l(mx)]'} \quad (2.78)$$

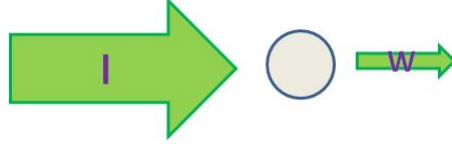
$$a_l = \frac{\mu m^2 j_l(mx)[xj_l(x)]' - \mu_1 j_l(x)[mxj_l(mx)]'}{\mu m^2 j_l(mx)[xh_l^{(1)}]' - \mu_1 h_l^{(1)}(x)[mxj_l(mx)]'} \quad (2.79)$$

$$b_l = \frac{\mu_1 j_l(mx)[xj_l(x)]' - \mu j_l(x)[mxj_l(mx)]'}{\mu_1 j_l(mx)[xh_l^{(1)}]' - \mu h_l^{(1)}(x)[mxj_l(mx)]'} \quad (2.80)$$

2.5. La eficiencia de Extinsión

Cuando un haz de luz de una determinada irradiancia I incide sobre una sola partícula, y se mide la potencia transmitida W tal como se muestra en la figura 2.5, se define la *sección eficaz de Scattering* como,

$$\sigma_{ext} = \frac{W}{I} \quad (2.81)$$



Se puede derivar una expresión para este factor en base al análisis llevado hasta ahora junto con el célebre teorema de la sección eficaz óptica. En este trabajo no se entrará en los detalles de este cálculo, pero se muestra a continuación el resultado en términos de la eficiencia de extinción Q_{ext} ,

$$Q_{ext} = \frac{\sigma_{ext}}{\pi a^2} = \frac{2}{(ka)^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) Re(a_l + b_l) \quad (2.82)$$

Que es la cantidad que vamos a calcular numéricamente.

2.6. El Experimento de Levitación Óptica.

En 1971, se reportó el primer experimento sobre levitación óptica por Arthur Ashkin en los laboratorios Bell. *Se demostró experimentalmente la levitación de pequeñas esferas transparentes de vidrio por medio de las fuerzas de presión de radiación [...] [2].* Este experimento resalta por la belleza del fenómeno y la simpleza de su montaje.

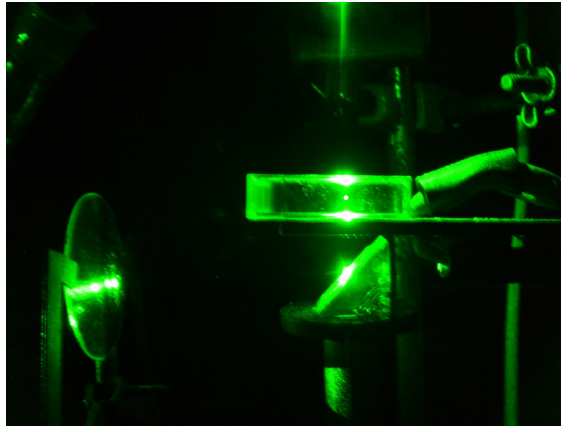


Figura 2.3: Esquema pictórico de una micro-esfera siendo levitada cerca de 0.5 cm por un haz láser dirigido verticalmente. La partícula se observa como un punto brillante gracias a la luz que dispersa.

Con el pasar del tiempo, se hicieron varios refinamientos para esta técnica, hasta que en 1977 se reportó *la primera observación de la variación de la fuerza de presión de radiación sobre esferas dieléctricas, con su tamaño y con la longitud de onda [1].* En la figura 2.4 se muestra el aparato básico de levitación. Una esfera dieléctrica se sitúa sobre el punto de equilibrio E por encima de la zona focal de un haz gaussiano de modo TEM_{00} . La gravedad y la fuerza axial hacia arriba del láser se contrapesan. El equilibrio de la esfera es estable porque cualquier desplazamiento del punto E resulta en una fuerza restauradora debido al cambio en la intensidad de la luz.

El sistema de retroalimentación de la figura 2.4 detecta la luz y la velocidad vertical de las partículas y la envía a un modulador electroóptico que controla la Potencia de la luz que sale para levitar la partícula P_{LEV} . El sistema puede fijar la posición promedio de la partícula a una determinada altura y así cambiar P_{LEV} .

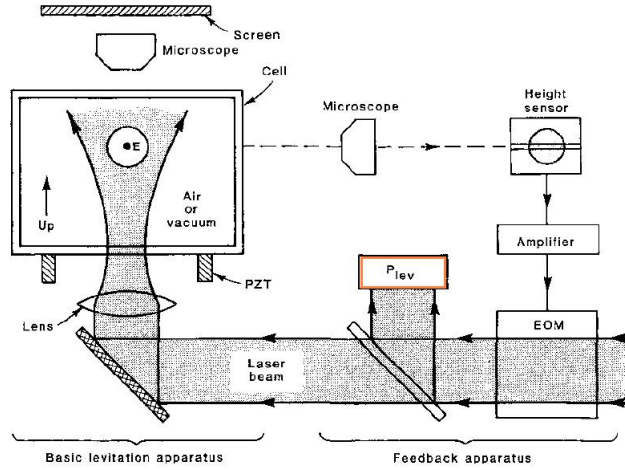


Figura 2.4: Aparato básico para levitar esferas dieléctricas y sistema de estabilización retroalimentado para levitación en vacío y medición de fuerzas. Abreviaturas: PZT, Vibrador Piezoléctrico de Cerámica; EOM, Modulador Electroóptico [3].

La medición de la dependencia de la longitud de onda en las fuerzas de presión de radiación sobre esferas dieléctricas por medio de técnicas de levitación óptica [1] estableció una nueva evidencia experimental de la teoría de Mie aquí desarrollada, revelando a su vez la existencia de una compleja espectroscopía de resonancias muy finas. Esto se ilustra en la curva de color azul de la figura 2.5, que muestra la variación de P_{LEV} para una gota de aceite esférica de aproximadamente $10 \mu m$ de diámetro.

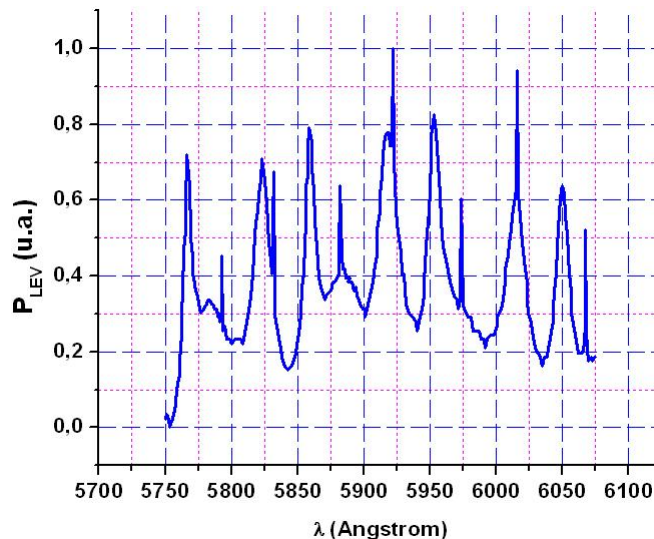


Figura 2.5: Comportamiento resonante de las fuerzas de presión de radiación sobre esferas dieléctricas [3]

Refiriéndonos a la figura 2.5, es de esperar que,

$$P_{LEV} \propto \frac{I}{t} - \frac{W}{t} = \frac{I}{t}(1 - Q_{ext}) \quad (2.83)$$

De tal manera que existe una proporcionalidad entre P_{LEV} y Q_{ext} . En el siguiente capítulo se explica la manera en que, a base de la teoría de Mie que se ha desarrollado, se calcula Q_{ext} , para luego hacer una comparación con la figura de arriba.

Capítulo 3

La Simulación de Resonancias Ópticas.

Para el cálculo de Q_{ext} se elaboró el Programa Ripple en Matlab,

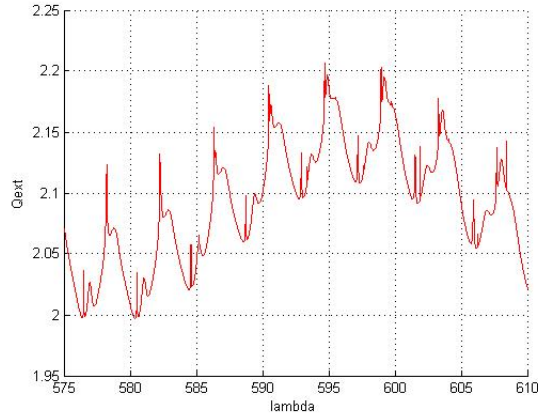
```
function ripple
Lmin=input('ingrese el menor valor de lambda en nm: Lmin=');
Lmax=input('ingrese el mayor valor valor de lambda en nm: Lmax=');
a=input('ingrese el radio de la esfera en nm, a=');
h=input('ingrese el paso del lambda h=');
L=[Lmin:h:Lmax]';
x=2*pi.*a./L;
m=input('ingrese el indice de refraccion relativo m=');
k=(Lmax-Lmin)/h+1; m2=m.*m;
for i=1:k
nmax=round(2+x(i)+4*(x(i))^(1/3));
n=(1:nmax); nu = (n+0.5); z=m.*x(i);
sqx= sqrt(0.5*pi./x(i)); sqz= sqrt(0.5*pi./z);
bx = besselj(nu, x(i)).*sqx;
bz = besselj(nu, z).*sqz;
yx = bessely(nu, x(i)).*sqx;
hx = bx+j*yx;
b1x=[sin(x(i))/x(i), bx(1:nmax-1)];
b1z=[sin(z)/z, bz(1:nmax-1)];
y1x=[-cos(x(i))/x(i), yx(1:nmax-1)];
h1x= b1x+j*y1x;
ax = x(i).*b1x-n.*bx;
az = z.*b1z-n.*bz;
ahx= x(i).*h1x-n.*hx;
an = (m2.*bz.*ax-bx.*az)./(m2.*bz.*ahx-hx.*az);
bn = (bz.*ax-bx.*az)./(bz.*ahx-hx.*az);
cn=2*n+1;
anp=real(an);
bnp=real(bn);
Re=anp+bnp;
dn=cn.*Re;
ter=[dn(1:nmax)];
q=sum(ter);
x2=x(i).*x(i);
Qext(i)=2*q/x2;
```

```

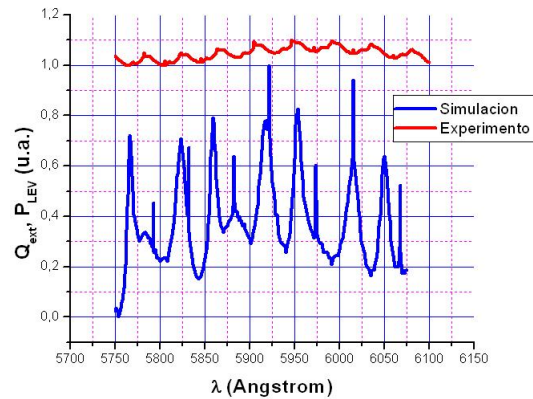
end
Q=Qext';
save datillos.tmp L Q /ascii;

```

Para obtener una gráfica que se pueda comparar a la de P_{LEV} del capítulo anterior, se tuvo que evaluar el programa para un índice de refracción relativo $m = 1,47$, y un radio para la partícula $a = 10 \mu m$ con un incremento en la longitud de onda de $h = 0,01$. El resultado se muestra en la figura 3.1(a).



(a)



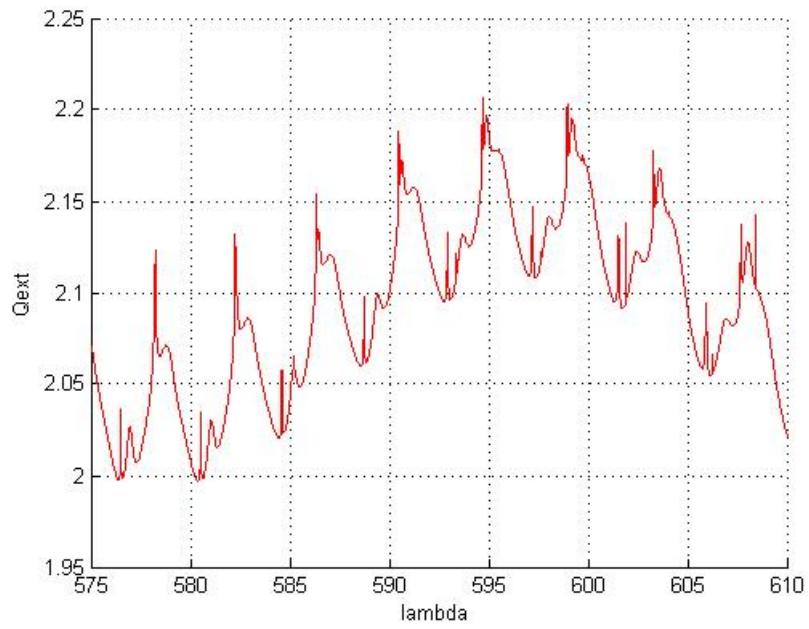
(b)

Figura 3.1: Comparación de los valores obtenidos para Q_{ext} utilizando el programa Ripple con los valores experimentales de [3].

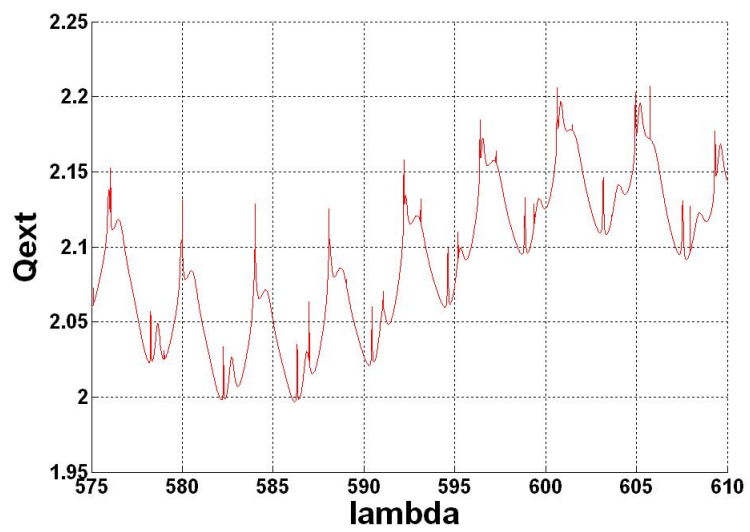
Al respecto se puede apreciar cierta coincidencia en los picos de cada gráfica para los valores de λ a que corresponden. Si ahora calculamos los valores de Q_{ext} para una esfera ligeramente más grande: $a = 10,1 \mu m$, se obtendría la gráfica de la figura 3.2(b). Se observa ahora que por causa del aumento de tamaño de una partícula, su correspondiente *espectro de fuerzas* de corre unos 2 nm aproximadamente.

Esta asociación, de un tamaño de partícula con un correspondiente espectro, sugiere la posibilidad de aplicar la técnica experimental de levitación óptica tanto para determinar un tamaño relativo de las partículas, como para determinar su tamaño absoluto con una precisión, para el presente caso, de,

$$\epsilon = \frac{\Delta a}{a} = \frac{0,10}{10} = 0,01$$



(a)



(b)

Figura 3.2: Comparación de los valores obtenidos para Q_{ext} para dos esferas de tamaño ligeramente distinto

3.1. Conclusiones

- Se ha logrado calcular el factor Q_{ext} mediante el programa Ripple, simulando el experimento de observación de resonancias ópticas de A. Ashkin.
- Se ha demostrado la existencia de un corrimiento espectral para las curvas de Q_{ext} con sólo ligeras variaciones del tamaño de las correspondientes partículas.
- El patron rizado que tiene la figura 3.1(a) puede ser aún más complejo si se discretizan más los valores de λ en los cálculos, obteniéndose más picos, sugiriendo así la posibilidad de la existencia real de estos si se pudiesen realizar experimentos de levitación que impliquen mediciones cada vez más finos de P_{LEV}

Bibliografía

- [1] A. Ashkin and J.M. Dziedzic. Observation of optical resonances in the radiation pressure on dielectric spheres. *Physical Review Letters*, 38(23):1351–1354 (1977).
- [2] A. Ashkin and J.M. Dziedzic. Optical levitation by radiation pressure. *Applied Physics Letters*, 19(8):283–285 (1971).
- [3] Arthur Ashkin. Applications of laser radiation pressure. *Science*, 410(4474):1081–1087 (1980).
- [4] Craig F. Bohren and Donald R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. John Wiley & Sons, Inc.
- [5] Max Born and Emil. Wolf. *Principles of Optics*. Cambridge University Press.
- [6] David J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics-3rd ed.* Prentice Hall Inc., 1999.
- [7] Eugene Hetch. *Optica 3ra Ed.* Addison Wesley Iberoamericana, S.A., 2000.
- [8] Helmuth Horvath. Gustav mie and the scattering and absorption of lighth particles: Historic developments and basics. *Journal of Radiative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110:787–799.