



**Universidad
Europea**

UNIVERSIDAD EUROPEA DE MADRID

ESCUELA DE ARQUITECTURA, INGENIERÍA Y DISEÑO

GRADO EN FÍSICA

TRABAJO FIN DE GRADO

SCATTERING DE LUZ POR UN CRISTAL RAYLEIGH

CARLOTA GONZÁLEZ RUIZ

Dirigido por

Dra. RAQUEL GÓMEZ MEDINA

CURSO 2024-2025

TÍTULO: Scattering de luz por un cristal Rayleigh

AUTOR: Carlota González Ruiz

TITULACIÓN: GRADO EN FÍSICA

DIRECTOR/ES DEL PROYECTO: Dra. Raquel Gómez Medina

FECHA: Mayo de 2025

RESUMEN

El presente trabajo pretende ampliar el conocimiento actual sobre el scattering de luz por un cristal Rayleigh. El problema central es la descripción de los campos electromagnéticos generados en este tipo de estructuras periódicas mediante la teoría formal de scattering y un conjunto de herramientas matemáticas auxiliares, que incluyen funciones de Green, funciones de Bessel, series y transformadas de Fourier y convergencia de sumas infinitas. A partir de este planteamiento, se ha desarrollado un código en Python que permite calcular las soluciones de la ecuación de bandas y representarlas. El resultado más importante es la representación gráfica de la estructura de bandas de una red de cilindros infinitos de silicio inmersos en aire, con constante dieléctrica independiente de la frecuencia y en ausencia de absorción, analizando la gráfica obtenida para distintos radios. La conclusión más relevante es el aumento del tamaño del gap fotónico a medida que crece el radio de los cilindros, evidenciando una relación directa entre geometría y respuesta espectral. Como aportaciones principales, se ilustra la posibilidad de controlar la transmisión de luz en el cristal Rayleigh iluminándolo con ciertas frecuencias, se establece un marco matemático específico para el régimen Rayleigh y se ofrece una contribución computacional que puede adaptarse a futuras investigaciones o aplicaciones en cristales fotónicos.

Palabras clave: scattering, cristal de Rayleigh, redes directa y recíproca, convergencia de sumas infinitas, estructura de bandas fotónicas, Python.

ABSTRACT

This work aims to expand current knowledge on light scattering by a Rayleigh crystal. The central problem is the description of the electromagnetic fields generated in such periodic structures using the formal theory of scattering, together with a set of auxiliary mathematical tools, including Green's functions, Bessel functions, Fourier series and transforms, and the convergence of infinite sums. Based on this approach, a Python code has been developed to compute and represent the solutions of the band equation. The most significant result is the graphical representation of the band structure of a periodic array of infinite silicon cylinders embedded in air, assuming a frequency-independent dielectric constant and absence of absorption and analyzing the resulting diagrams for different cylinder radii. The main conclusion is that the photonic band gap increases with the cylinder radius, revealing a direct relationship between geometry and spectral response. The main contributions include illustrating the possibility of controlling light transmission in a Rayleigh crystal by tuning the frequency of the incident wave, establishing a specific mathematical framework for the Rayleigh regime, and offering a computational tool that can be adapted for future research or applications in photonic crystals.

Keywords: scattering, Rayleigh crystal, direct and reciprocal lattices, convergence of infinite sums, photonic band structure, Python.

AGRADECIMIENTOS

A mi familia y a mi tutora Raquel, que han impulsado mi aprendizaje durante estos cuatro años.

“Nature uses only the longest threads to weave her patterns, so each small piece of her fabric reveals the organization of the entire tapestry.”

— Richard P. Feynman

TABLA RESUMEN

	DATOS
Nombre y apellidos:	Carlota González Ruiz
Título del proyecto:	Scattering de luz por un cristal Rayleigh
Directores del proyecto:	Raquel Gómez Medina
El proyecto se ha realizado en colaboración de una empresa o a petición de una empresa:	NO
El proyecto ha implementado un producto: (esta entrada se puede marcar junto a la siguiente)	NO
El proyecto ha consistido en el desarrollo de una investigación o innovación: (esta entrada se puede marcar junto a la anterior)	SI
Objetivo general del proyecto:	Ampliar el conocimiento actual sobre el <i>scattering</i> de luz generado en el interior de un cristal Rayleigh

Índice

RESUMEN	4
ABSTRACT	5
TABLA RESUMEN	8
Índice de Ecuaciones	12
Capítulo 1. INTRODUCCIÓN / ESTADO DEL ARTE	14
1.1 Estado del arte	14
1.2 Contexto y justificación.....	15
1.3 Planteamiento del problema	16
Capítulo 2. OBJETIVOS.....	17
2.1 Objetivos generales	17
2.2 Objetivos específicos	17
2.3 Beneficios del proyecto	17
Capítulo 3. DESARROLLO DEL TFG	18
3.1 Planificación del trabajo fin de grado	18
3.2 Descripción de la solución, metodologías y herramientas empleadas.....	19
3.3 Recursos requeridos	24
3.4 Resultados del TFG.....	24
Capítulo 4. DISCUSIÓN.....	25
4.1 Introducción teórica	25
4.2 Ecuación de bandas	27
4.3 Estructura de bandas	35
Capítulo 5. CONCLUSIONES	40
5.1 Conclusiones del trabajo.....	40
5.2 Conclusiones personales.....	40
Capítulo 6. FUTURAS LÍNEAS DE TRABAJO	41
Capítulo 7. REFERENCIAS.....	42
Capítulo 8. ANEXOS	45
8.1 Uso de Inteligencia Artificial	45
8.2 Código empleado	46

8.3	Teoría formal de Scattering	62
-----	-----------------------------------	----

Índice de Figuras

Figura 3-1: Esquema del cristal a considerar.	21
Figura 3-2: Vista superior del cristal.....	21
Figura 3-3: a) Red directa en el espacio real. b) Red recíproca de la red cuadrada.....	22
Figura 3-4: a) Representación de las primeras 8 zonas de Brillouin de una red cuadrada. b) Esquema de las direcciones de simetría del cristal en la primera zona de Brillouin.	23
Figura 4-1: Esquema de cristales fotónicos unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales, donde los colores representan materiales con distintas constantes dieléctricas.	25
Figura 4-2: Representación gráfica del cálculo de la parte imaginaria de la suma frente a la frecuencia para una red de 9 cilindros (círculos) y 6561 cilindros (cuadrados).....	34
Figura 4-3: Cálculo y representación de $-\Im S_0$ para el punto M, $K = 2\pi a(0.5, 0.5)$	37
Figura 4-4: Camino recorrido en el espacio recíproco.	37
Figura 4-5: Cálculo y representación de la estructura de bandas para una red de cilindros de silicio rodeados de aire.	38

Índice de Ecuaciones

Ecuación 3.1	21
Ecuación 3.2	22
Ecuación 3.3	22
Ecuación 3.4	23
Ecuación 4.1	25
Ecuación 4.2	25
Ecuación 4.3	26
Ecuación 4.4	26
Ecuación 4.5	26
Ecuación 4.6	26
Ecuación 4.7	27
Ecuación 4.8	27
Ecuación 4.9	27
Ecuación 4.10	27
Ecuación 4.11	28
Ecuación 4.12	28
Ecuación 4.13	28
Ecuación 4.14	28
Ecuación 4.15	28
Ecuación 4.16	29
Ecuación 4.17	29
Ecuación 4.18	29
Ecuación 4.19	29
Ecuación 4.20	29
Ecuación 4.21	30
Ecuación 4.22	30
Ecuación 4.23	30
Ecuación 4.24	30
Ecuación 4.25	30

Ecuación 4.26	31
Ecuación 4.27	31
Ecuación 4.28	31
Ecuación 4.29	31
Ecuación 4.30	31
Ecuación 4.31	32
Ecuación 4.32	32
Ecuación 4.33	32
Ecuación 4.34	32
Ecuación 4.35	33
Ecuación 4.36	33
Ecuación 4.37	33
Ecuación 4.38	33
Ecuación 4.39	33
Ecuación 4.40	33
Ecuación 4.41	34
Ecuación 4.42	35
Ecuación 4.43	35
Ecuación 4.44	35
Ecuación 4.45	36
Ecuación 4.46	36
Ecuación 8.1	62
Ecuación 8.2	63
Ecuación 8.3	63
Ecuación 8.4	63
Ecuación 8.5	64
Ecuación 8.6	64
Ecuación 8.7	64

Capítulo 1. INTRODUCCIÓN / ESTADO DEL ARTE

El estudio de *scattering* de luz en medios materiales es fundamental en óptica y fotónica, ya que permite comprender fenómenos como la dispersión atmosférica, la propagación de señales ópticas y la manipulación de la luz en dispositivos avanzados [Saleh 2019].

En el contexto de este proyecto, los cristales Rayleigh son cristales fotónicos caracterizados por estar compuestos de partículas cuyo tamaño es mucho menor que la longitud de onda de los fotones [Bohren 2008]. Esto implica que la interacción entre la luz y el material sigue el régimen de dispersión de Rayleigh, lo que condiciona su respuesta espectral y abre la puerta a posibles aplicaciones en diversos sectores tecnológicos [Joannopoulos 2008].

Para la comprensión del fenómeno de estudio en detalle, es necesario entender los siguientes aspectos fundamentales con el objetivo de construir un marco teórico sólido:

1. **Cristales Rayleigh:** Diferencias entre cristales fotónicos clásicos y cristales Rayleigh, efectos de la dispersión múltiple e interferencia, influencia de la geometría y distribución espacial de los elementos dispersores.
2. **Teoría formal de *scattering*:** Amplitud de scattering, campo dispersado, desarrollo de Mie para pequeños cilindros, aproximación de partícula pequeña.
3. **Electromagnetismo:** Ecuaciones de Maxwell, campos electromagnéticos, formalismo de onda plana, polarización.
4. **Interacción luz-materia:** Ecuación de ondas, constante dieléctrica y dependencia de la frecuencia, índice de refracción.
5. **Conceptos de Física del Estado Sólido y Electrónica Física:** Estructura periódica, redes directa y recíproca, formación de bandas de energía, zonas prohibidas (*gaps*).
6. **Base matemática:** Ecuaciones diferenciales, problemas de autovalores, análisis de funciones de Green, funciones de Hankel, funciones de Bessel, series y transformadas de Fourier, convergencia de sumas infinitas.
7. **Programación en Python:** Representación de funciones matemáticas, manejo de las librerías necesarias.

1.1 Estado del arte

En esta investigación se analiza el comportamiento de la luz en un sistema formado por partículas dispersoras mucho más pequeñas que la longitud de onda colocadas formando una estructura periódica, donde la dispersión de Rayleigh domina la interacción luz-materia.

La idea de posicionar a los fotones como posibles portadores de información surgió en 1987, cuando Eli Yablonovitch y Sajeev John propusieron el uso de estructuras dieléctricas con índices de refracción periódicos para controlar la transmisión de la luz, estableciendo un paralelismo con las bandas electrónicas de los semiconductores [Yablonovitch 1987] [John 1987]. Así, Yablonovitch introdujo el concepto de *gaps* fotónicos, rangos de frecuencias en los que la densidad de estados fotónica es nula y la luz no puede propagarse dentro del material [Yablonovitch 1987].

Uno de los hitos más relevantes en este campo se alcanzó en 1991 con la fabricación del primer cristal fotónico tridimensional que presentaba un *gap* fotónico completo. Se demostró que era posible inhibir la propagación de la luz en todas las direcciones para determinadas frecuencias, confirmando experimentalmente la viabilidad de este material [Yablonovitch 1991] y consolidándose como una de las innovaciones más prometedoras en el campo de la fotónica.

Desde entonces, se han logrado importantes avances en investigaciones teóricas sobre redes periódicas de nanocilindros que han consolidado un marco físico-matemático cada vez más desarrollado. Entre ellos, se ha demostrado, utilizando modelos analíticos basados en la aproximación dipolar y en la dispersión múltiple, que cerca de las frecuencias de Rayleigh pueden aparecer resonancias geométricas que permiten alcanzar reflexión o absorción totales en condiciones bien definidas [Gómez 2006][Laroche 2006]. Además, se ha extendido la teoría para incluir correcciones en partículas anisótropas [Albaladejo 2010], esenciales para garantizar la conservación de energía en el modelo.

Investigaciones posteriores han profundizado en la fabricación de cristales fotónicos mediante técnicas avanzadas de nanofabricación. Esto ha permitido diseñar estructuras adaptadas a necesidades tecnológicas específicas [Joannopoulos 1997] [Sakoda 2001], encontrando aplicaciones en telecomunicaciones, biomedicina y computación cuántica [Navarro-Barón 2015].

1.2 Contexto y justificación

Cuando dicho cristal fotónico se compone de un conjunto de nanopartículas dieléctricas en un medio homogéneo, separadas por distancias del orden de la longitud de onda, el comportamiento óptico está dominado por la dispersión de Rayleigh [Viktorov 1967]. En este caso de estudio, llamado cristal Rayleigh, se observan efectos de interferencia y resonancia en las ondas dispersadas, dando lugar a estructuras de bandas específicas.

Tal y como se ha mencionado, la mayoría de los estudios hasta la fecha se han centrado en cristales fotónicos formados por partículas de tamaño comparable o mayor que la longitud de onda. Aunque existe literatura científica sobre el régimen sub longitud de onda que describe fenómenos de dispersión, reflexión y absorción [Gómez 2006] [Laroche 2006], no se aborda explícitamente el estudio de la estructura de bandas fotónicas de estos cristales.

Por lo tanto, el objetivo del presente proyecto es aportar nuevo conocimiento a este prometedor campo de estudio, proporcionando una descripción matemática y computacional de la ecuación y estructura de bandas en un cristal Rayleigh.

Adicionalmente, a nivel profesional, este trabajo forma parte de mi trayectoria en investigación, ya que el estudio de estos cristales podría abrir el camino hacia una computación fotónica avanzada, donde la dispersión controlada sirva para manipular la información de manera eficiente [Kim 2018].

1.3 Planteamiento del problema

Tal y como se ha mencionado, aunque el estudio de cristales fotónicos ha avanzado considerablemente desde la formulación inicial de los gaps fotónicos por Yablonovitch y John, la mayoría de la literatura científica se ha centrado en estructuras compuestas por elementos dispersores de tamaño comparable a la longitud de onda de la luz [Yablonovitch 1987] [John 1987]. En ese contexto, las teorías desarrolladas permiten describir con precisión la formación de bandas fotónicas y su utilidad práctica en dispositivos ópticos.

Sin embargo, aunque existen estudios teóricos sobre redes periódicas de partículas pequeñas, son aún escasos los trabajos que ofrezcan una descripción completa del comportamiento de la luz en cristales formados por partículas mucho menores que la longitud de onda, donde domina la dispersión de Rayleigh [Bohren 2008].

Por tanto, el problema central que aborda este trabajo es la descripción de los campos electromagnéticos que produce un cristal de Rayleigh aplicando teoría de scattering, así como el desarrollo computacional y análisis gráfico de la estructura de bandas resultante.

En concreto, se modelizará una red periódica bidimensional cuadrada infinita compuesta por cilindros idénticos paralelos a lo largo del eje OZ, donde se asume que los cilindros son de un material dieléctrico isótropo (ϵ_c) y se encuentran separados por vacío (ϵ_0) una distancia a [Gómez 2004]. El desarrollo del modelo elegido se lleva a cabo en detalle en el apartado 3.2.3.

Capítulo 2. OBJETIVOS

2.1 Objetivos generales

El objetivo general del presente trabajo consiste en ampliar el conocimiento actual sobre el *scattering* de luz generado en el interior de un cristal Rayleigh, mediante la deducción y representación de la correspondiente estructura de bandas.

2.2 Objetivos específicos

Los objetivos concretos son los siguientes:

- Realizar una labor de documentación acerca del estado del arte.
- Estudiar y entender la teoría formal de *scattering*.
- Modelar el problema mediante una red periódica para definir su red recíproca.
- Calcular y obtener la ecuación de bandas a partir del campo eléctrico total del sistema.
- Desarrollar el código con *Python* para describir las soluciones obtenidas.
- Analizar los resultados y sacar conclusiones.

Cabe mencionar brevemente los objetivos que quedan fuera del alcance de este proyecto:

- La elaboración de cualquier tipo de configuración experimental.
- La búsqueda de materiales cuyas propiedades físicas permitan su implementación en este área de estudio.
- El análisis de la viabilidad de los cristales Rayleigh en computación y su integración en circuitos convencionales.

2.3 Beneficios del proyecto

Este proyecto contribuye significativamente al estudio de la luz en medios periódicos, al centrarse en un tema aún poco explorado en profundidad. Por ello, uno de los beneficios principales es la formalización de un marco matemático adaptado al régimen Rayleigh, facilitando posibles avances teóricos en este campo de investigación.

Además, hay una contribución computacional, ya que se desarrolla un código en Python que genera desde cero la estructura de bandas en el cristal Rayleigh, lo que representa una herramienta base que puede ser ampliada o adaptada para futuras investigaciones.

Por último, aunque el enfoque es teórico, este trabajo tiene el potencial de influir en el diseño de dispositivos ópticos que aprovechen las propiedades de los cristales Rayleigh, así como inspirar nuevas líneas de investigación en fotónica y materiales avanzados.

Capítulo 3. DESARROLLO DEL TFG

3.1 Planificación del trabajo fin de grado

3.1.1 Cronograma

La realización del proyecto se ajusta al siguiente cronograma:

Semana	Fechas	Etapas									
		a	b	c	d	e	f	g	h	i	j
Sem. 1 - Sem. 19	16 Sep. - 26 Ene.										
Sem. 20	27 Ene. - 02 Feb.										
Sem. 21	03 Feb. - 09 Feb.										
Sem. 22	10 Feb. - 16 Feb.										
Sem. 23	17 Feb. - 23 Feb.										
Sem. 24	24 Feb. - 02 Mar.										
Sem. 25	03 Mar. - 09 Mar.										
Sem. 26	10 Mar. - 16 Mar.										
Sem. 27	17 Mar. - 23 Mar.										
Sem. 28	24 Mar. - 30 Mar.										
Sem. 29	31 Mar. - 06 Abr.										
Sem. 30	07 Abr. - 13 Abr.										
Sem. 31	14 Abr. - 20 Abr.										
Sem. 32	21 Abr. - 27 Abr.										
Sem. 33	28 Abr. - 04 May.										
Sem. 34	05 May. - 11 May.										
Sem. 35	12 May. - 18 May.										
Sem. 36	19 May. - 25 May.										
Sem. 37	26 May. - 01 Jun.										
Sem. 38	02 Jun. - 08 Jun.										
Sem. 39	09 Jun. - 15 Jun.										
Sem. 40	16 Jun. - 22 Jun.										
Sem. 41	23 Jun. - 29 Jun.										

3.1.2 Etapas

El proyecto se divide en las siguientes etapas:

a. Obtención de referencias: Este proceso ha sido realizado a lo largo de todo el proyecto, ya que parte del desarrollo teórico se fundamenta en la bibliografía existente.

b. Reunión con director del TFG: Durante todo el desarrollo del proyecto se han tenido reuniones periódicas con el director del proyecto para comentar el progreso y realización de

este. Las reuniones se organizaron una vez compatibilizada la agenda del autor y el director del proyecto, manteniendo una reunión cada quince días como mínimo.

c. Estudio y entendimiento de la teoría de *scattering*

d. Modelado del problema mediante una red periódica

e. Cálculo y obtención de la ecuación de bandas

f. Desarrollo del código con *Python* para describir las soluciones

g. Análisis de resultados y conclusiones

h. Redacción de la memoria del TFG: El trabajo se redactó una vez obtenidos los objetivos del proyecto.

i. Preparación de la presentación para la defensa del TFG: Tras la redacción y revisión de la memoria, se preparó la presentación y defensa del TFG.

j. Defensa del proyecto: Una vez superados todos los requisitos exigidos en el desarrollo del TFG, se realizará la defensa en una de las convocatorias fijadas por la Universidad Europea de Madrid.

3.2 Descripción de la solución, metodologías y herramientas empleadas

3.2.1 Metodología general

La metodología del proyecto se ha estructurado en distintas fases complementarias teniendo en cuenta los objetivos planteados en el capítulo anterior:

- **Revisión teórica** de los fundamentos físicos de la teoría formal de *scattering* y obtención de referencias.
- **Desarrollo del modelo utilizado y punto de partida teórico**, a través de la definición de la geometría de la red y posteriormente la solución de las ecuaciones de Maxwell en un medio dieléctrico periódico.
- **Cálculo de la ecuación de bandas** a partir del campo eléctrico total del sistema, teniendo en cuenta la simetría axial que surge de la geometría cilíndrica del problema. Para ello, se emplea la función de Green en el espacio libre y la función de Hankel de primera especie y de orden cero.
- **Cálculo de la convergencia de la ecuación de bandas**, a partir del conjunto de sumas resultante de la difracción electromagnética por obstáculos ordenados periódicamente. Se hace de uso de la fórmula de Poisson, la transformada de Fourier y sus propiedades y el teorema de adición de las funciones de Hankel.
- **Formulación y representación de la estructura de bandas** para una constante dieléctrica independiente de la frecuencia, empleando herramientas computacionales.
- **Elaboración de conclusiones** teniendo en cuenta los hallazgos clave del estudio.

3.2.2 Herramientas computacionales

Para abordar tanto los aspectos analíticos como los visuales del fenómeno de estudio, se han empleado herramientas computacionales que han permitido formalizar el modelo físico elegido, realizar cálculos numéricos y representar gráficamente los resultados obtenidos.

Las principales herramientas utilizadas son:

- **Python 3.13.2** como lenguaje base para el desarrollo computacional, por su versatilidad y gran ecosistema científico.
- **Librerías específicas:**
 - **NumPy** y **SciPy** para el cálculo matricial, formulación de expresiones complejas y resolución de sistemas relacionados con la propagación de ondas en medios periódicos.
 - **SymPy** para el tratamiento simbólico, útil especialmente en la formulación general de soluciones analíticas antes de implementar las simulaciones.
 - **Matplotlib** y **Seaborn** para la representación gráfica de los resultados.
 - **Scipy.special** para el uso de funciones de Bessel y Hankel.
 - **Sklearn.linear_model** para el uso de un modelo de regresión RANSAC.
- **Jupyter Notebooks**, como entorno interactivo para combinar código, anotaciones y resultados de forma estructurada y fácilmente replicable.

3.2.3 Modelo

El modelo del que se parte en este estudio es una red periódica cuadrada infinita compuesta por cilindros idénticos paralelos a lo largo del eje OZ, donde se asume que los cilindros son de un material dieléctrico isótropo (ϵ_c) y se encuentran separados por vacío (ϵ_0) una distancia a [Gómez 2004].

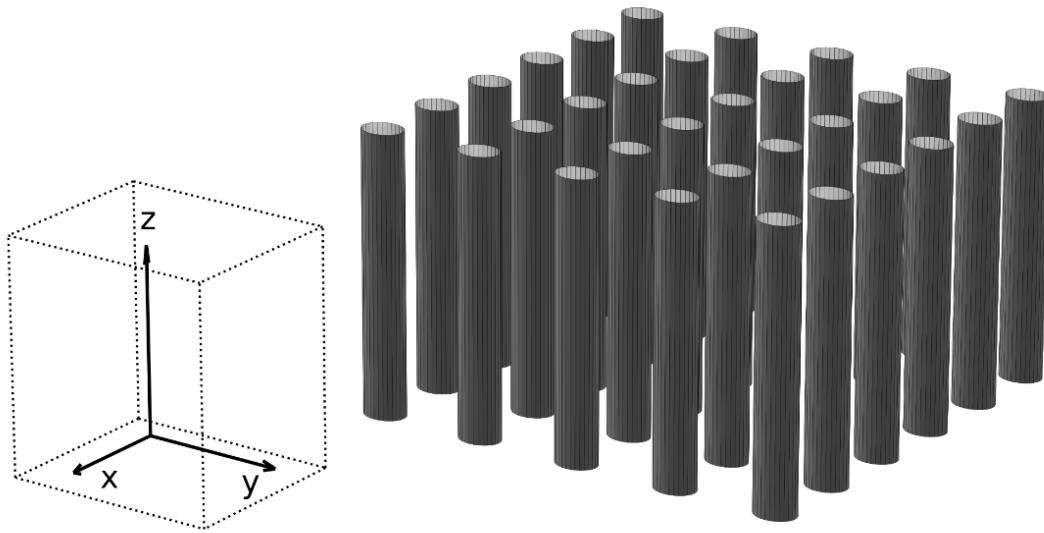


Figura 3-1: Esquema del cristal a considerar.

Cabe mencionar que, al estar trabajando sobre un cristal Rayleigh, por definición, se cumple:

Ecuación 3.1

$$r_0 \ll \lambda$$

Donde r_0 es el radio del cilindro y λ es la longitud de onda de la luz.

El aspecto de mayor interés para el presente estudio no es la representación tridimensional del cristal, sino más bien su modelado a través de la red de Bravais cuadrada que subyace en la estructura al tomar la vista bidimensional del plano XY. Siendo los puntos que forman la red los centros de las bases de los cilindros.

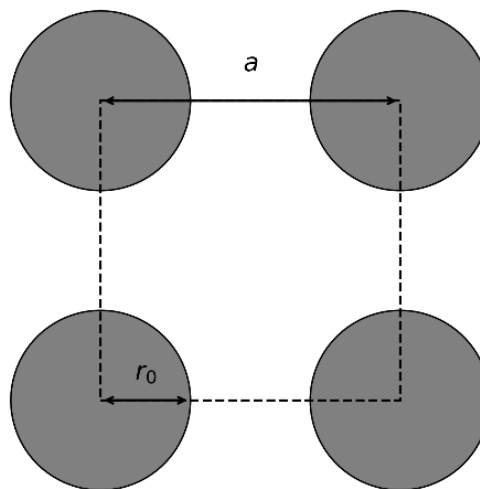


Figura 3-2: Vista superior del cristal.

Toda red de Bravais se puede generar de forma infinita a través de la traslación de unos vectores primitivos $\vec{a}_1$ y $\vec{a}_2$. De manera que, eligiendo como origen el eje de un cilindro, el resto de ellos se encontrarán en:

Ecuación 3.2

$$\vec{R}_p = \{p_1 \vec{a}_1 + p_2 \vec{a}_2\}, \text{ donde } p \equiv (p_1, p_2) \in \mathbb{Z}^2.$$

Para una red cuadrada, los vectores primitivos serán iguales a los vectores unitarios en las direcciones x e y, respectivamente, multiplicados por el parámetro de red, $(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = a(\hat{u}_x, \hat{u}_y)$.

De forma que la correspondiente red recíproca quedará definida por:

Ecuación 3.3

$$\vec{K}_h = \frac{2\pi}{a} \{h_1 \hat{u}_x + h_2 \hat{u}_y\}, \text{ donde } h \equiv (h_1, h_2) \in \mathbb{Z}^2.$$

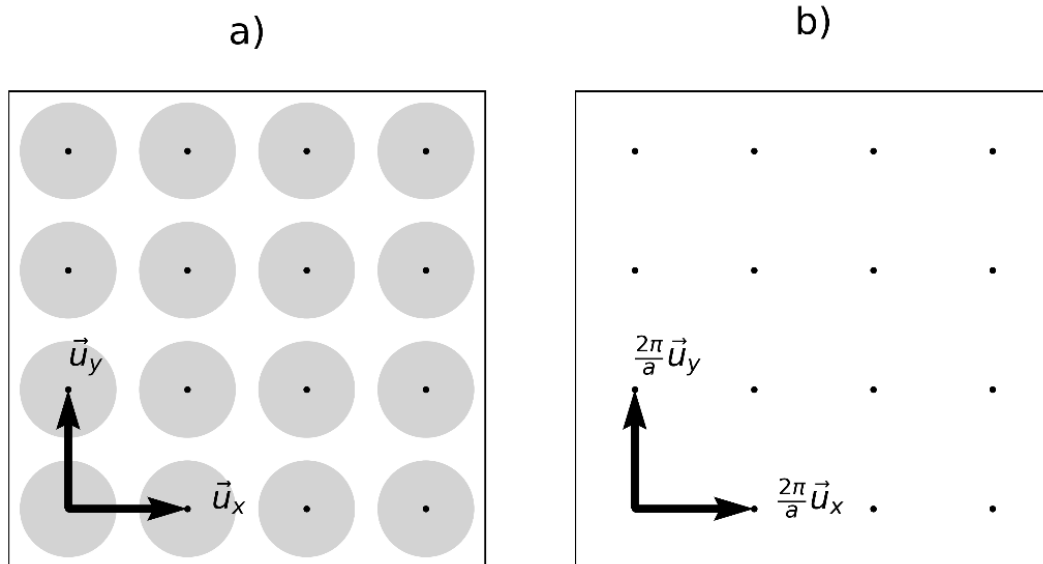


Figura 3-3: a) Red directa en el espacio real. b) Red recíproca de la red cuadrada.

Por completitud, se menciona que, dado que las áreas de todas las zonas de Brillouin son equivalentes, siempre servirá con estudiar la primera zona de Brillouin. A continuación, se

representan también las direcciones de simetría del cristal en la primera zona de Brillouin, que serán relevantes en el estudio posterior de la estructura de bandas.

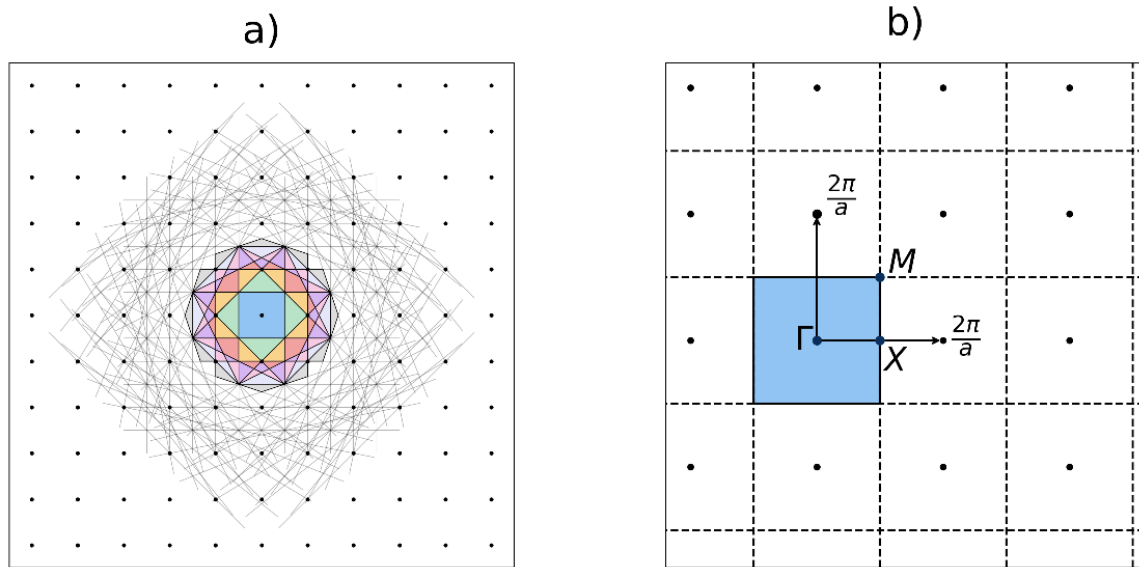


Figura 3-4: a) Representación de las primeras 8 zonas de Brillouin de una red cuadrada. b) Esquema de las direcciones de simetría del cristal en la primera zona de Brillouin.

Más allá de la geometría de la red y en cuanto a la interacción electromagnética, este modelo asume que los campos que se propagan en el cristal tienen polarización S. Es decir, oscilan paralelamente a los ejes de los cilindros, en la dirección perpendicular al plano de propagación XY [Gómez 2004].

Se puede demostrar que, cuando el tamaño del cilindro dieléctrico es mucho menor que longitud de onda incidente (Ecuación 3.1), la amplitud de scattering es proporcional al primer armónico cilíndrico. Por lo tanto, el scattering es isótropo y se considera que los cilindros dispersan por igual en todas las direcciones, esta es la aproximación de partícula pequeña [Rayleigh 1881]. Ver Anexo 8.3.2.

Por lo tanto, es posible describir los cilindros a través de su amplitud de scattering:

Ecuación 3.4

$$4\pi f = 4ic_0^{[s]}$$

siendo $c_0^{[s]}$ el primer coeficiente de la expansión en armónicos cilíndricos.

3.3 Recursos requeridos

1. **Conocimiento** de conceptos físicos clave, base matemática y nociones de programación (Ver Capítulo 1).
2. **Entorno de programación** con Python como lenguaje base y posibilidad de instalar las librerías necesarias.
3. **Mentoría de experto/a** en Física de la Materia Condensada.

3.4 Resultados del TFG

Los resultados finales obtenidos han satisfecho completamente los objetivos específicos establecidos en la sección 2.2. De manera que:

- Se han comprendido los conocimientos necesarios sobre la teoría formal de scattering y se ha investigado el estado del arte.
- Se ha modelado el cristal de estudio mediante una red periódica cuadrada, definiendo a su vez sus direcciones de simetría en el espacio recíproco.
- Se ha desarrollado matemáticamente la ecuación de bandas partiendo del campo eléctrico total del sistema.
- Se ha generado un conjunto de bloques de código con Python que halla las soluciones obtenidas a la ecuación de bandas y representa gráficamente la estructura de bandas fotónicas.
- Se han sacado conclusiones a partir de la interpretación de los resultados obtenidos.

Capítulo 4. DISCUSIÓN

4.1 Introducción teórica

Para describir la luz en un cristal fotónico es necesario resolver las ecuaciones de Maxwell en un medio dieléctrico periódico [Gómez 2004]. Dado que no se consideran permeabilidades magnéticas distintas de la del vacío, se estudia el caso de polarización S en el que:

$$\mu_1 = \mu_2, \quad \varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$$

y se puede tomar $\varepsilon = n^2$. Por lo que la naturaleza del cristal fotónico quedará definida por la periodicidad del índice de refracción n de los materiales dieléctricos que lo componen, a lo largo de una o más direcciones del espacio [Joannopoulos 2008]. Esto permite clasificarlos en unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales [Sakoda 2001].

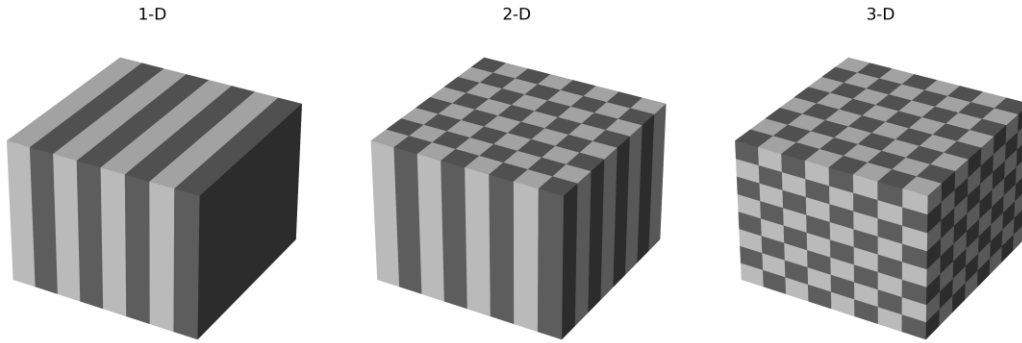


Figura 4-1: Esquema de cristales fotónicos unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales, donde los colores representan materiales con distintas constantes dieléctricas.

El caso de estudio (Figura 3-1: Esquema del cristal a considerar.) se traduce en un cristal fotónico bidimensional, cuya ecuación de ondas general es [Gómez 2004]:

Ecuación 4.1

$$\frac{1}{\varepsilon_p(\omega, \vec{\rho})} \nabla^2 \varphi(\vec{\rho}) + \frac{\omega^2}{c^2} \varphi(\vec{\rho}) = 0$$

donde $\vec{\rho} \equiv (x, y)$ es un vector genérico del plano de propagación XY, c es la velocidad de la luz en el vacío, $\varphi(\vec{\rho})$ representa el campo en el eje Z, tal que:

$$\varphi(\vec{\rho}) = \begin{cases} E_z(\vec{\rho}) & \text{polarización S} \\ H_z(\vec{\rho}) & \text{polarización P} \end{cases}$$

y ε_p es la constante dieléctrica del sistema, cuyo valor varía periódicamente respecto del conjunto de vectores de la red como:

Ecuación 4.2

$$\varepsilon_p(\omega, \vec{\rho}) \equiv \varepsilon_p(\omega, \vec{\rho} + \vec{R}_p)$$

siendo $\vec{R}_p$ el vector de traslación de la red cuadrada (Ecuación 3.2).

El tratamiento matemático del problema varía sustancialmente dependiendo de si la constante dieléctrica del sistema ε_p depende o no de la frecuencia ω .

Cuando $\varepsilon_p(\vec{\rho})$ es puramente espacial y no depende de la frecuencia de la radiación electromagnética, el problema físico se puede formular como una ecuación diferencial lineal. El operador diferencial que actúa sobre el campo es:

Ecuación 4.3

$$\hat{O} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon_p(\vec{\rho})} \nabla \cdot \right)$$

De forma que la ecuación se convierte en un problema de autovalores lineales con autovalor proporcional al cuadrado de la frecuencia:

Ecuación 4.4

$$\hat{O}\varphi(\vec{\rho}) = -\frac{\omega^2}{c^2} \varphi(\vec{\rho})$$

Para geometrías arbitrarias, este problema se puede resolver mediante métodos estándar [Gómez 2004]. Entre ellos destacan la expansión en bases de ondas planas (PWM: *plane-wave expansion*) [Joannopoulos 2008], el método de la matriz de transferencia (TTM: *transfer matrix method*) [Yeh 2005] y la aproximación multigrad (*multigrid approach*) [Briggs 2000].

En contraste, si la constante dieléctrica del sistema depende de la frecuencia, el problema adquiere un carácter no lineal. En este caso, el operador $\hat{O}$ depende explícitamente de ω ,

Ecuación 4.5

$$\hat{O}(\omega) = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon_p(\omega, \vec{\rho})} \nabla \cdot \right)$$

lo que implica que el problema deja de ser lineal en ω^2 .

Ecuación 4.6

$$\hat{O}(\omega)\varphi(\vec{\rho}) + \frac{\omega^2}{c^2} \varphi(\vec{\rho}) = 0$$

Con lo cual, la ecuación se transforma en un problema de autovalores no lineales, cuya resolución implica encontrar simultáneamente un ω y φ que satisfagan la condición, lo cual requiere estrategias numéricas avanzadas que a menudo utilizan métodos iterativos [Herrmann 2003].

La teoría que se expone en este estudio aborda el caso independiente de la frecuencia, sin embargo, se basa en una formulación general que no impone restricciones en cuanto a la dependencia de la frecuencia [Gómez 2004], ni sobre la posible presencia de absorción. Este enfoque general está fundamentado en conceptos de teoría formal de scattering, el método de Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) para bandas electrónicas en sólidos [Ashcroft 1976], y técnicas de expansión multipolar [Asatryan 2001] [Asatryan 2003].

4.2 Ecuación de bandas

4.2.1 Cálculo de la ecuación de bandas

Dado que se considera que no hay campo entrante, es posible descomponer el campo eléctrico total del sistema como una suma de las contribuciones individuales de cada cilindro. Como se mencionó en la sección 3.2.3, en el modelo utilizado se ha asumido que los campos que se propagan en el cristal tienen polarización S. Por lo tanto, si se representa $E(\vec{\rho})$ como el campo total en el plano transversal, este puede escribirse como:

Ecuación 4.7

$$E(\vec{\rho}) = E^{sc}(\vec{\rho}) = \sum_n E_n^{sc}(\vec{\rho})$$

donde $E_n^{sc}(\vec{\rho})$ es el campo dispersado por el n -ésimo cilindro, ubicado en $\vec{R}_n$.

Cada cilindro irradia por igual en todas las direcciones un campo en respuesta a la excitación que recibe del resto del sistema. Esta excitación se denota $E_{inc}(\vec{R}_n)$ y representa el campo total exceptuando el campo que emite el cilindro n -ésimo como fuente.

Ecuación 4.8

$$E_{inc}(\vec{R}_n) = E(\vec{R}_n) - E_n^{sc}(\vec{R}_n)$$

La dispersión se modela a través de una función de Green del espacio libre [Gómez 2004], denotada por $g_0(\vec{\rho}, \vec{R}_n)$, que describe la propagación del campo desde el cilindro n -ésimo hacia el punto genérico del observador $\vec{\rho}$:

Ecuación 4.9

$$E_n^{sc}(\vec{\rho}) \approx E_{inc}(\vec{R}_n) \cdot 4\pi f \cdot g_0(\vec{\rho}, \vec{R}_n)$$

donde f es la amplitud de scattering.

Sustituyendo en la Ecuación 4.8:

Ecuación 4.10

$$\begin{aligned} E_{inc}(\vec{R}_n) &= \sum_p E_p^{sc}(\vec{R}_n) - E_n^{sc}(\vec{R}_n) = \sum_{p \neq n} E_p^{sc}(\vec{R}_n) \\ &= 4\pi f \sum_{p \neq n} E_{inc}(\vec{R}_p) \cdot g_0(\vec{R}_n, \vec{R}_p) \end{aligned}$$

Por completitud se menciona que, en un medio periódico como el cristal de estudio, las soluciones al campo eléctrico adoptan la forma de modos de Bloch, caracterizados por una función periódica modulada por una fase $e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$.

Por lo tanto, explotando la simetría traslacional del cristal, se puede suponer que el campo incidente en cada cilindro es idéntico salvo por un factor de fase dependiente de la distancia, tal que:

Ecuación 4.11

$$E_{inc}(\vec{R}_p) = E_{inc}(0) \cdot e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p}$$

Donde se está tomando como origen $\vec{R}_n = 0$ y $\vec{K}$ representa el vector de onda de los modos que se propagan en la primera zona de Brillouin.

De las dos ecuaciones anteriores se deduce:

$$E_{inc}(0) = 4\pi f \cdot E_{inc}(0) \sum_{p \neq 0} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p} \cdot g_0(0, \vec{R}_p)$$

Ecuación 4.12

$$\frac{1}{4\pi f} - \sum_{p \neq 0} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p} \cdot g_0(0, \vec{R}_p) = 0$$

En dos dimensiones y para una fuente puntual, la función de Green del espacio libre viene dada por la función de Hankel de primera especie y orden cero $H_0^{(1)}$ [Joannopoulos 2008]:

Ecuación 4.13

$$g_0(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{i}{4} H_0^{(1)}\left(\frac{\omega}{c} |\vec{r} - \vec{r}'|\right)$$

Esta expresión describe el campo que se propaga desde una fuente puntual situada en $\vec{r}'$ hasta un punto de observación $\vec{r}$, para ondas cilíndricas en un medio homogéneo. Aplicando esto al caso de estudio, es posible sustituir dicha expresión para hallar la ecuación de bandas como:

Ecuación 4.14

$$\frac{1}{4\pi f} - \frac{i}{4} \sum_{p \neq 0} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p} \cdot H_0\left(\frac{\omega}{c} R_p\right) = 0$$

donde $R_p = |\vec{R}_p| = |\vec{r} - \vec{r}'|$ y $H_0 \equiv H_0^{(1)}$.

Se denomina esta suma, que contiene toda la información necesaria sobre la estructura periódica del cristal y las condiciones de propagación de las ondas, como:

Ecuación 4.15

$$S_0(\omega, \vec{K}) = \sum_{p \neq 0} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p} \cdot H_0\left(\frac{\omega}{c} R_p\right)$$

Tanto la amplitud de scattering f como la función de Hankel son complejas, por lo que resulta natural separar parte real e imaginaria, obteniendo las ecuaciones [Gómez 2004]:

Ecuación 4.16

$$\Re\left\{\frac{1}{4\pi f}\right\} + \frac{1}{4}\Im\{S_0(\omega, \vec{K})\} = 0$$

Ecuación 4.17

$$\Im\left\{\frac{1}{4\pi f}\right\} - \frac{1}{4}\Re\{S_0(\omega, \vec{K})\} = 0$$

que serán fundamentales para calcular la estructura de bandas en las direcciones de máxima simetría del cristal.

4.2.2 Convergencia de la ecuación de bandas

Como se ha visto, la solución del problema implica una suma infinita de términos que representa la contribución de todos los elementos del cristal periódico. Esta suma infinita debe truncarse en la práctica para obtener un resultado computacionalmente manejable. Por tanto, un problema fundamental es determinar cuántos términos deben conservarse para alcanzar una determinada precisión en los cálculos [Gómez 2004].

En este contexto, se estudian sumas de la forma [Nicorovici 1994]:

Ecuación 4.18

$$S_l(\omega, \vec{K}) = \sum_{p \neq 0} H_l\left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho} - \vec{R}_p|\right) e^{il\phi_p} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p}$$

donde se recuerda que $\vec{R}_p = \{p_1 \vec{a}_1 + p_2 \vec{a}_2\}$, con $p \equiv (p_1, p_2) \in \mathbb{Z}^2$ (Ecuación 3.2) y $\vec{\rho} \equiv (x, y)$ es un vector genérico del plano de propagación.

La suma de interés para este estudio se reescribe:

Ecuación 4.19

$$S_0(\omega, \vec{K}) = \sum_{p_1 \neq -\infty}^{\infty} \sum_{p_2 \neq -\infty}^{\infty} H_0\left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho} - \vec{R}_p|\right) e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p} - H_0\left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho}|\right)$$

con objetivo de acelerar la convergencia de la serie aplicando la fórmula de Poisson, que relaciona una suma discreta con una suma de transformadas de Fourier, tal que:

Ecuación 4.20

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} f(\alpha n, \beta m) = \frac{1}{\alpha\beta} \sum_{\eta, \nu=-\infty}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^2} \exp\left\{\frac{i2\pi\eta}{\alpha} x, \frac{i2\pi\nu}{\beta} y\right\} f(x, y) dx dy$$

Esto permite expresar la suma en términos de la red recíproca $\vec{K}_h$ (Ecuación 3.3) con $h \equiv (h_1, h_2) \equiv (\eta, \nu)$.

Tomando $\vec{K} = 0$, la expresión queda:

Ecuación 4.21

$$S_0(\omega, 0) = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{K}_h \cdot \vec{\rho}'} H_0\left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho} - \vec{\rho}'|\right) d^2 \vec{\rho}' - H_0\left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho}|\right)$$

donde se puede observar que el término integral se corresponde con la transformada de Fourier bidimensional de la función de Hankel H_0 , centrada en $\vec{\rho}$ y evaluada en $\vec{K}_h$:

Ecuación 4.22

$$\mathcal{F}\left[H_0^{(1)}(k|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|)\right](\vec{K}_h) = \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\vec{K}_h \cdot \vec{\rho}'} H_0^{(1)}(k|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|) d^2 \vec{\rho}'$$

Así, la suma:

$$\sum_h \int e^{i\vec{K}_h \cdot \vec{\rho}'} H_0\left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho} - \vec{\rho}'|\right) d^2 \vec{\rho}'$$

es una superposición de las transformadas de Fourier de la función de Hankel, evaluadas en cada punto del espacio recíproco marcado por $\vec{K}_h$. Este procedimiento es relevante porque logra trasladar el análisis del espacio real -difícil por la lentitud de convergencia- al espacio recíproco, donde las sumas convergen mucho más deprisa gracias a la forma del integrando [Arfken 2013].

Es de utilidad recordar que la función de Hankel de primera especie y orden cero $H_0^{(1)}(kr)$ es una solución fundamental de la ecuación no homogénea de Helmholtz en dos dimensiones [Gómez 2004]:

Ecuación 4.23

$$\nabla^2 H_0 + k^2 H_0 = 4i\delta(\vec{\rho} - \vec{\rho}')$$

Haciendo uso de la siguiente propiedad fundamental de la transformada de Fourier en $\mathbb{R}^n$ [Stein 2003]:

Ecuación 4.24

$$\mathcal{F}[\Delta f](\vec{\xi}) = -|\vec{\xi}|^2 \hat{f}(\vec{\xi}),$$

la ecuación se transforma como:

Ecuación 4.25

$$(k^2 - K_h^2)H_{\vec{K}} = -4ie^{i\vec{K}_h \cdot \vec{\rho}'} \Rightarrow H_{\vec{K}} = -\frac{4ie^{i\vec{K}_h \cdot \vec{\rho}'}}{(k^2 - K_h^2)}$$

con

$$H_{\vec{K}} \equiv \int H_0 e^{i\vec{K}_h \cdot \vec{\rho}} d^2 \vec{\rho} \quad y \quad H_0 \equiv \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int d^2 \vec{K} H_{\vec{K}} e^{-i\vec{K}_h \cdot \vec{\rho}}$$

Por tanto, la suma $S_0(\omega, 0)$ se puede escribir como:

Ecuación 4.26

$$S_0(\omega, 0) = -4i \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{e^{i\vec{K}_h \cdot \vec{\rho}}}{\left(\vec{K}_h \vec{K}_h - \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \right)} \right\} - H_0 \left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho}| \right)$$

Para obtener el caso general $S_0(\omega, \vec{K})$, se aplica de nuevo una propiedad de las transformadas de Fourier [Stein 2003]:

“Sea $f e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}$ con transformada de Fourier $\mathcal{F}_{\vec{K}}(\vec{K})$ integrable en un recinto de área A , aunque f no sea integrable en este recinto, su transformada de Fourier simplemente será $\mathcal{F}_{\vec{K}}(\vec{K} + \vec{k})$ ”.

Se tiene, entonces, que:

Ecuación 4.27

$$S_0(\omega, \vec{K}) = -\frac{4i}{A} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{e^{i\vec{Q}_h \cdot \vec{\rho}}}{\left(\vec{Q}_h \vec{Q}_h - \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \right)} \right\} - H_0 \left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho}| \right)$$

con $\vec{Q}_h = \vec{K} + \vec{K}_h$ y $A = a^2$ para una celda de la red cuadrada [Gómez 2004].

Volviendo a la ecuación inicial para un l arbitrario:

Ecuación 4.28

$$S_l(\omega, \vec{K}) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} H_l \left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho} - \vec{R}_p| \right) e^{il\phi_p} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p} - H_l \left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho}| \right)$$

El objetivo pasa a ser obtener esta expresión en coordenadas polares, con $\vec{\rho} = (\rho, \phi)$ y $\vec{R}_p = (R_p, \phi_p)$, para poder proyectarla sobre funciones de Bessel y hacer integraciones angulares.

El teorema de adición de las funciones de Hankel [Morse 1953], establece que para $\rho < R_p$:

Ecuación 4.29

$$H_0^{(1)}(|\vec{\rho} - \vec{R}_p|) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} H_l^{(1)} \left(\frac{\omega}{c} R_p \right) J_l \left(\frac{\omega}{c} \rho \right) e^{il(\phi - \phi_p)}$$

donde J_l es la función de Bessel de primera especie y orden l . Con esta expansión se consigue separar de forma explícita la dependencia angular de la radial, lo cual permite proyectar el campo sobre modos angulares l , facilitando considerablemente la evaluación de integrales y la identificación de contribuciones modales individuales [Watson 1995].

Entonces, se puede desarrollar:

Ecuación 4.30

$$S_0(\omega, \vec{K}) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} H_0 \left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho} - \vec{R}_p| \right) e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p} - H_0 \left(\frac{\omega}{c} |\vec{\rho}| \right)$$

$$= \sum_{p=-\infty}^{\infty} \left\{ \sum_l e^{il(\phi_p - \phi)} J_l\left(\frac{\omega}{c}\rho\right) H_l\left(\frac{\omega}{c}R_p\right) \right\} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_p} - H_0\left(\frac{\omega}{c}\rho\right)$$

de forma que se obtiene:

Ecuación 4.31

$$S_0(\omega, \vec{K}) = \sum_l e^{-il\phi} J_l\left(\frac{\omega}{c}\rho\right) S_l(\omega, \vec{K}, \rho = 0)$$

Esta expresión permite descomponer la suma como una superposición de modos angulares. De manera que cada término representa una contribución específica de orden l , que puede ser evaluada individualmente usando propiedades ortogonales de las funciones de Bessel [Colton 2013].

Por otra parte, a partir de la Ecuación 4.27:

$$S_0(\omega, \vec{K}) = -\frac{4i}{A} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{e^{i\vec{Q}_h \cdot \vec{\rho}}}{\left(\vec{Q}_h \cdot \vec{Q}_h - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right)} \right\} - H_0\left(\frac{\omega}{c}|\vec{\rho}|\right)$$

Ecuación 4.32

$$= -\frac{4i}{A} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\left(\vec{Q}_h \cdot \vec{Q}_h - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right)} \left\{ \sum_{l=-\infty}^{+\infty} (i)^l e^{il\phi_h} e^{-il\phi} J_l(Q_h \rho) \right\} - H_0\left(\frac{\omega}{c}\rho\right)$$

con $\vec{\rho} = (\rho, \phi)$ y $\vec{Q}_h = (Q_h, \phi_h)$, luego [Gómez 2004]:

Ecuación 4.33

$$\begin{aligned} & \sum_l e^{-il\phi} J_l\left(\frac{\omega}{c}\rho\right) S_l(\omega, \vec{K}, \rho = 0) \\ &= -\frac{4i}{A} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} (i)^l e^{-il\phi} \left\{ \sum_{h=-\infty}^{+\infty} e^{il\phi_h} \frac{J_l(Q_h \rho)}{\left(\vec{Q}_h \cdot \vec{Q}_h - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right)} \right\} - H_0\left(\frac{\omega}{c}\rho\right) \end{aligned}$$

Integrando en ϕ :

Ecuación 4.34

$$J_l\left(\frac{\omega}{c}\rho\right) S_l(\omega, \vec{K}, \rho = 0) = -\frac{4i(i)^l}{A} \left\{ \sum_{h=-\infty}^{+\infty} e^{il\phi_h} \frac{J_l(Q_h \rho)}{\left(\vec{Q}_h \cdot \vec{Q}_h - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right)} \right\} - H_0\left(\frac{\omega}{c}\rho\right) \delta_{l0}$$

y aplicando las siguientes propiedades de la integración de funciones de Bessel y de Neumann [Watson 1995]:

Ecuación 4.35

$$\int_0^a \xi^{l+1} J_l(b\xi) d\xi = \frac{a}{b} J_{l+1}(ba)$$

Ecuación 4.36

$$\int_0^a \xi^{l+1} N_l(b\xi) d\xi = \frac{a}{b} N_{l+1}(ba) + \frac{2^{l+1} l!}{\pi b^{l+2}}$$

se obtiene:

Ecuación 4.37

$$J_{l+1}\left(\frac{\omega}{c}\rho\right) S_l(\omega, \vec{K}, \rho = 0) = -4(i)^{l+1} \frac{\left(\frac{\omega}{c}\right)}{A} \left\{ \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{il\phi_h}}{Q_h} \frac{J_{l+1}(Q_h a)}{\left(\vec{Q}_h \vec{Q}_h - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right)} \right\} - H_1\left(\frac{\omega}{c}a\right) \delta_{l0} - \frac{i}{\pi a} \frac{2^{l+1} l!}{\left(\frac{\omega}{c}\right)^{l+2}}$$

luego finalmente la expresión que se buscaba es [Gómez 2004]:

Ecuación 4.38

$$S_0(\omega, \vec{K}) = -\frac{1}{J_1\left(\frac{\omega}{c}\rho\right)} \left\{ H_1\left(\frac{\omega}{c}a\right) + \frac{2i}{\pi a \left(\frac{\omega}{c}\right)} + \frac{4i \left(\frac{\omega}{c}\right)}{A} \left\{ \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{Q_h} \frac{J_1(Q_h a)}{\left(\vec{Q}_h \vec{Q}_h - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right)} \right\} \right\}$$

donde $\vec{Q}_h = \vec{K} + \vec{K}_h$ y $A = a^2$. Esta expresión final para $S_0(\omega, \vec{K})$ representa el resultado completo de la reconstrucción del campo dispersado.

Para analizar la convergencia de la serie por el método computacional, es útil representar la parte imaginaria de la suma, $-\frac{\Im\{S_0(\omega, \vec{K})\}}{4}$, frente a la frecuencia $\frac{\omega a}{2\pi c}$ [Gómez 2004], con:

Ecuación 4.39

$$-\frac{\Im\{S_0(\omega, \vec{K})\}}{4} = \frac{1}{J_1\left(\frac{\omega}{c}\rho\right)} \left\{ \frac{1}{4} N_1\left(\frac{\omega}{c}a\right) + \frac{1}{2\pi a \left(\frac{\omega}{c}\right)} + \frac{1}{a^2} \left(\frac{\omega}{c}\right) \left\{ \sum_h \frac{1}{K_h} \frac{J_1(K_h a)}{\left(K_h^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right)} \right\} \right\}$$

donde se ha fijado $\vec{K} = 0$ y $\vec{K}_h = \frac{2\pi}{a} \{h_1 \hat{u}_x + h_2 \hat{u}_y\}$, $h \equiv (h_1, h_2)$.

Cabe mencionar la definición fundamental de la función de Hankel [Arfken 2013]:

Ecuación 4.40

$$H_v^{(1)}(x) = J_v(x) + iN_v(x)$$

que establece la función de Neumann $N_v(x)$ como la parte imaginaria de $H_v^{(1)}(x)$.

Cada punto graficado representará el valor de la parte imaginaria de la suma para un único valor de ω , con una suma sobre h . El cálculo numérico consiste en evaluar todos los términos y guardar ese valor como un punto del gráfico. Para más detalles, ver el Código empleado.

Primero se genera un rango de índices enteros $(h_1, h_2) \in [-N, N] \times [-N, N]$ que representa las dimensiones de la red y da lugar a un total de $(2N + 1)^2$ términos en el sumatorio, con objetivo de controlar el truncamiento de la serie infinita.

Se ha elegido comparar las gráficas resultantes para una red de 9 cilindros, donde $N = 3$ y se obtienen 121 términos de la suma, y para una red de 6561 cilindros, donde $N = 18$ y se obtienen 1369 términos. En ambos casos se han representado 40 puntos en el vector utilizado para el eje x. Adicionalmente, se ha añadido la curva continua correspondiente al caso $N = 3$ para ilustrar la exactitud del cálculo.

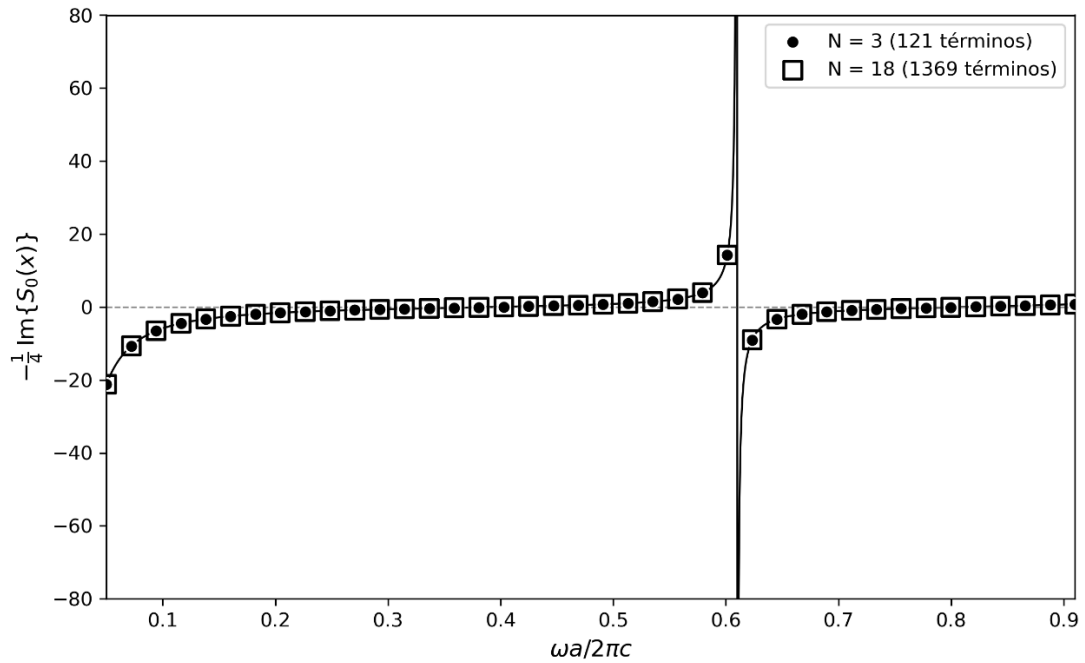


Figura 4-2: Representación gráfica del cálculo de la parte imaginaria de la suma frente a la frecuencia para una red de 9 cilindros (círculos) y 6561 cilindros (cuadrados).

Como se puede observar, la suma converge en 0 de forma exacta, a excepción de divergencias causadas por el polo simple que se genera en el denominador del sumatorio. De forma que, cuando el vector de onda incidente coincide con un modo de la red recíproca, se cumple:

Ecuación 4.41

$$Q_h = \frac{\omega}{c}$$

y se anula el denominador, haciendo que la función diverja e indicando una singularidad espectral de Green en medio periódico [McPhedran 1999].

El hecho de que se obtenga la misma curva variando las dimensiones de la red demuestra la rápida convergencia de la serie. Aun así, la convergencia se podría acelerar repitiendo el último proceso de integración las veces que sea necesario [Gómez 2004].

4.3 Estructura de bandas

De cara al análisis de la formación de bandas en el cristal Rayleigh, se tiene en cuenta que este estudio se centra en una constante dieléctrica ε independiente de la frecuencia y considera longitudes de onda lejanas de las resonancias de Mie de los cilindros.

Además, es importante valorar la naturaleza compleja de la constante dieléctrica, cuya parte imaginaria podría complicar notablemente la resolución del problema.

Si se asume que la absorción del sistema es lo suficientemente débil, se pueden tratar sus efectos de forma perturbativa y considerar únicamente la parte real de la constante dieléctrica en la ecuación de bandas [Gómez 2004].

En tal caso, la Ecuación 4.17 siempre se cumple:

Ecuación 4.42

$$\Re\{S_0(\omega, \vec{K})\} = \Im\left\{\frac{1}{\pi f}\right\} = -1 \quad y \quad \vec{Q}_h \in \mathbb{R}$$

y el estudio se centra en la Ecuación 4.16, sustituyendo a través de la Ecuación 4.39:

Ecuación 4.43

$$\Re\left\{\frac{1}{4\pi f}\right\} - \frac{1}{J_1\left(\frac{\omega}{c}\rho\right)} \left\{ \frac{1}{4} N_1\left(\frac{\omega}{c}a\right) + \frac{1}{2\pi a\left(\frac{\omega}{c}\right)} + \frac{1}{a^2\left(\frac{\omega}{c}\right)} \left\{ \sum_h \frac{1}{Q_h} \frac{J_1(Q_h a)}{Q_h^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2} \right\} \right\} = 0$$

De cara a la representación gráfica, es de utilidad realizar el cambio de variable $x = \frac{\omega a}{2\pi c}$, de manera que:

Ecuación 4.44

$$-\frac{1}{4} \Im\{S_0(x)\} = \frac{1}{J_1(2\pi\rho'x)} \left\{ \frac{1}{4} N_1(2\pi x) + \frac{1}{4\pi^2 x} + \frac{x}{4\pi^2} \left\{ \sum_h \frac{1}{Q'_h} \frac{J_1(2\pi Q'_h)}{Q'^2_h - x^2} \right\} \right\} = 0$$

donde $Q'_h = \sqrt{Q_x^2 + Q_y^2}$, al haber sacado factor común de $\frac{2\pi}{a}$ en todos los términos Q_h .

En ausencia de absorción y para scattering isótopo, $\Re\left\{\frac{1}{4\pi f}\right\}$ se comporta como una función monótona decreciente [Gómez 2004] y puede graficarse para un valor dado de ε . Por otro lado, la parte imaginaria de $S_0(\omega, \vec{K})$, como ya se ha demostrado, presenta una serie de divergencias. Así, la ecuación de bandas tendrá al menos tantas soluciones como divergencias contiene la suma [Gómez 2004].

La estrategia del cálculo computacional será, por tanto, obtener y graficar: $-\frac{\Im\{S_0(\omega, \vec{K})\}}{4}$ para el punto M $\left(\vec{K} = \frac{2\pi}{a}(0.5, 0.5)\right)$ de la primera zona de Brillouin (Figura 3-1) y $\Re\left\{\frac{1}{4\pi f}\right\}$ para $\varepsilon = 11.9$ (silicio cristalino), frente a la frecuencia.

Los puntos de corte entre ambas curvas serán las soluciones de la ecuación de bandas para el punto M. Al evaluarse posteriormente para distintas direcciones de simetría, será posible construir la estructura de bandas del cristal de estudio.

Dado que el contraste dieléctrico no varía considerablemente con la frecuencia, para estudiar la estructura de bandas del cristal, se puede considerar una ε efectiva constante. Es decir, se puede tratar la propagación de ondas en el medio periódico como si este tuviera una respuesta efectiva homogénea [Botten 2001]. En este contexto, la constante dieléctrica efectiva ε_{ef} se aproximará a la constante física real del material, en este caso, la del silicio.

En este régimen, la parte real de la amplitud de scattering $f(\omega)$ puede considerarse una función suave con la frecuencia, marcando la dependencia de la curva $\Re\left\{\frac{1}{4\pi f}\right\}$. En concreto, para un cilindro dieléctrico, la amplitud de scattering para el modo $l = 0$ se comporta como [Sakoda 2001]:

Ecuación 4.45

$$f(\omega) \sim \frac{1}{\ln(\omega a) + cte.}$$

Si además se asume que la constante dieléctrica no varía con la frecuencia y las longitudes de onda son largas, como es el caso, entonces el coeficiente de dispersión se puede expandir en potencias de ω , y típicamente [Sakoda 2001]:

Ecuación 4.46

$$f(\omega) \propto \omega^2$$

De forma que, para ε_{ef} constante, $\Re\left\{\frac{1}{4\pi f}\right\}$ decrece proporcionalmente a ω^{-2} [Gómez 2004], mientras que $-\frac{\Im\{S_0(\omega, \vec{K})\}}{4}$ crece suavemente con ω y diverge en puntos determinados.

Por lo que se deduce que, dado que una función es monótonamente decreciente y la otra es monótonamente creciente con una divergencia vertical, es inevitable que se corten una única vez antes de la divergencia -si lo hacen- o justo en la divergencia, si no alcanzan a cortarse antes.

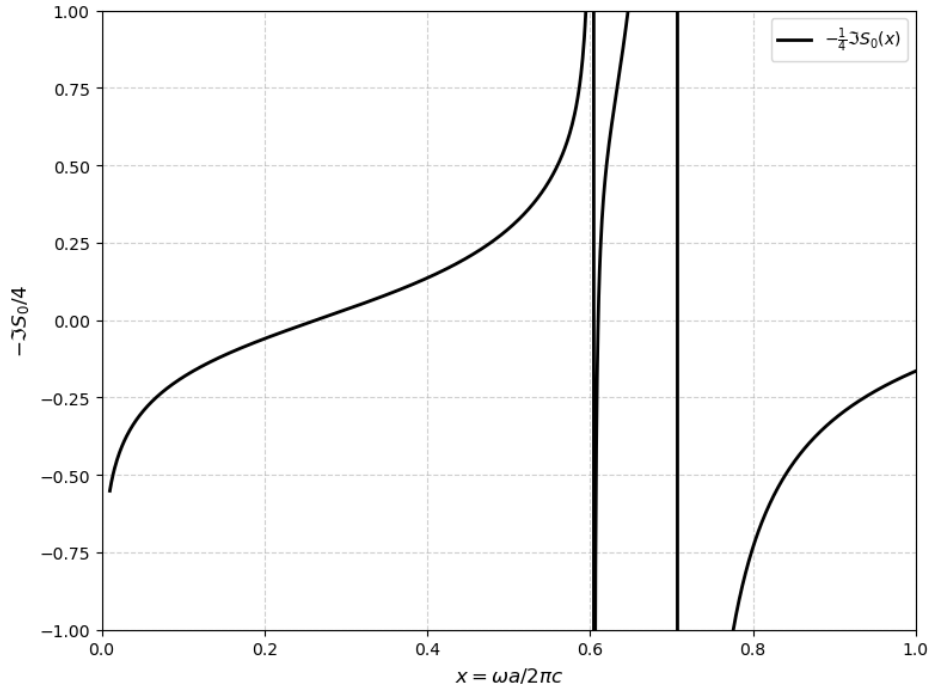


Figura 4-3: Cálculo y representación de $-\frac{\Im\{S_0(x)\}}{4}$ para el punto M , $\vec{K} = \frac{2\pi}{a}(0.5, 0.5)$.

La estructura de bandas se obtendrá entonces, recorriendo las direcciones de máxima simetría de la primera zona de Brillouin (Figura 3-4).

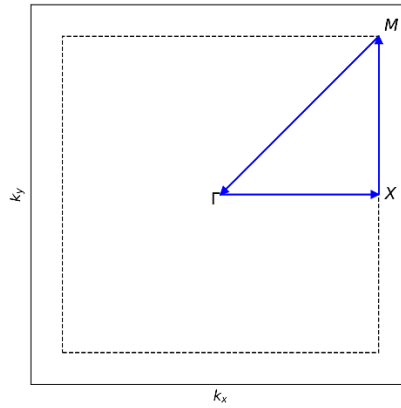


Figura 4-4: Camino recorrido en el espacio recíproco.

En la siguiente figura se representa finalmente el cálculo de la estructura de bandas, como la relación entre la variable x y el vector $\vec{K}$, obtenida para cilindros de silicio ($\varepsilon = 11.9$) inmersos en aire, para distintos radios de cilindro. El parámetro α indica el radio del cilindro en comparación con el parámetro de red de manera que $r_0 = \alpha \cdot a$.

Por completitud se menciona que en este cálculo se han utilizado la Ecuación 8.6 y la Ecuación 8.7 para calcular $\Re\left\{\frac{1}{4\pi f}\right\}$, en función también de la variable x .

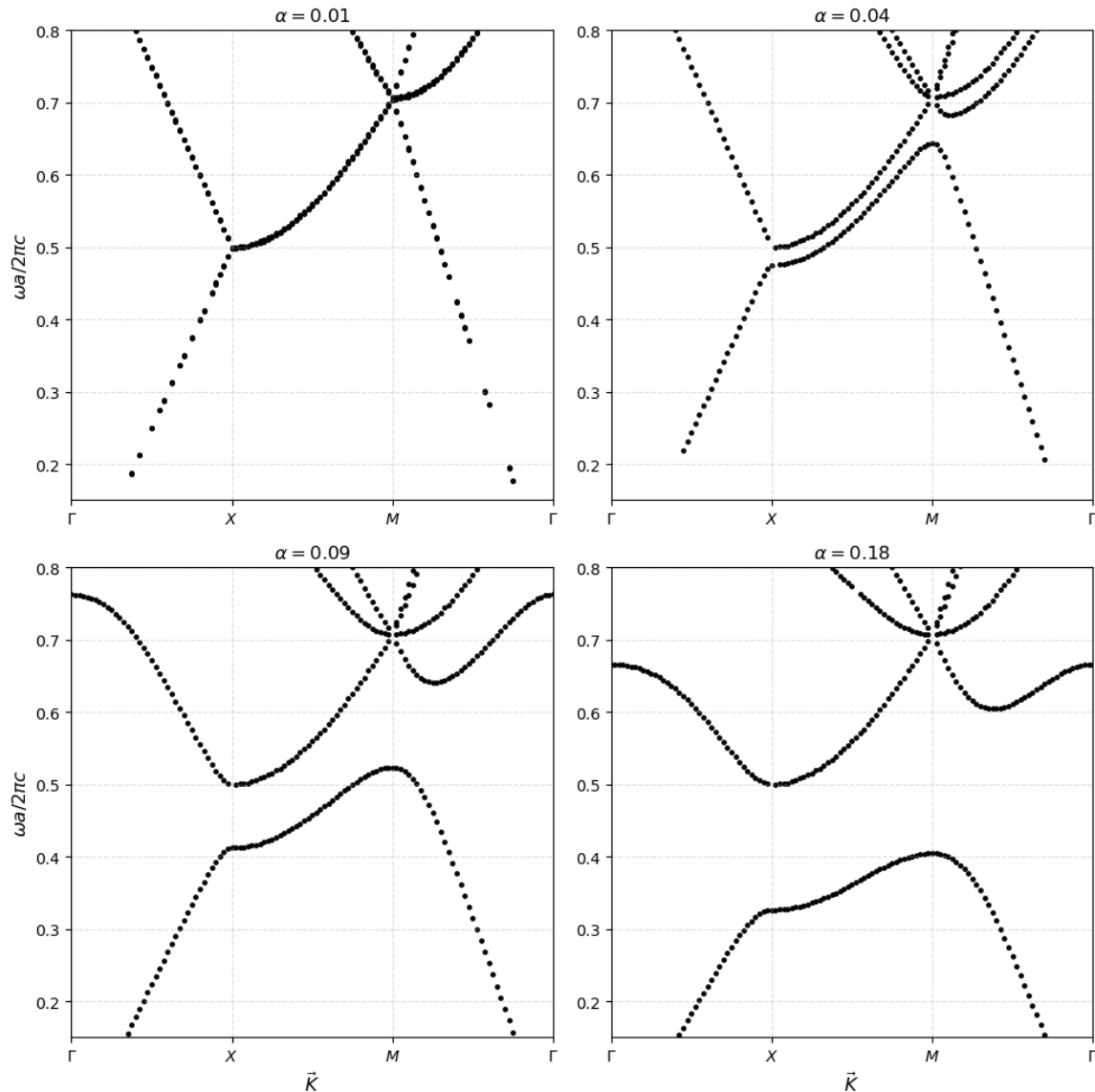


Figura 4-5: Cálculo y representación de la estructura de bandas para una red de cilindros de silicio rodeados de aire.

Como se puede observar, a medida que aumenta el radio del cilindro, aumenta también el tamaño del gap entre la primera y segunda banda, hasta lograr un gap fotónico completo en la sub-figura correspondiente a $\alpha = 0.18$ [Gómez 2004].

Es importante comentar el cálculo matemático en la obtención de esta figura, más allá de lo ya mencionado. En el desarrollo de la representación visual se detectaron dos bandas perfectamente rectas que aparecían sistemáticamente en todas las gráficas. Al no estar justificadas por la evolución teórica del trabajo, se ha tomado la decisión de omitirlas en la representación visual con el fin de ofrecer una imagen más fiel al contenido espectral real del sistema.

Para detectar y eliminar estos resquicios visuales no físicos, se ha aplicado el algoritmo RANSAC (*Random Sample Consensus*), una técnica de ajuste de modelos que identifica secuencias de puntos que se alinean con una recta, ignorando los que no siguen esa tendencia.

Por último, la Figura 4-5 pone de manifiesto la similitud del comportamiento del cristal Rayleigh con los cristales semiconductores tradicionales, donde el control preciso del gap energético es fundamental para sus aplicaciones electrónicas [Joannopoulos 2008].

Sin embargo, los cristales de Rayleigh ofrecen ventajas únicas que potencialmente permitirían operaciones más rápidas y eficientes energéticamente. La posibilidad futura de integrarse en dispositivos optoelectrónicos miniaturizados sugiere que estos cristales podrían desempeñar un papel crucial en el futuro de la tecnología, complementando o incluso sustituyendo a los semiconductores tradicionales en ciertas áreas.

Capítulo 5. CONCLUSIONES

5.1 Conclusiones del trabajo

A lo largo del estudio se ha adquirido una comprensión sólida de los cristales Rayleigh y la teoría formal de *scattering*, a la vez que se han aplicado conocimientos de muchas y diversas asignaturas estudiadas en el grado, dando lugar a un resultado completo e interpretable.

Se puede concluir que el producto final del trabajo ha cumplido exactamente el objetivo general, que consistía en ampliar el conocimiento actual sobre el *scattering* de luz generado en el interior de un cristal Rayleigh, mediante la deducción y representación de la correspondiente estructura de bandas. Aun así, el proceso podría haberse visto reforzado con cálculos numéricos más robustos y estables, evitando así la necesidad de aplicar técnicas adicionales como RANSAC para filtrar resultados no deseados.

5.2 Conclusiones personales

Este trabajo ha supuesto para mí una experiencia muy enriquecedora tanto a nivel académico como personal. A lo largo del desarrollo del TFG he podido profundizar en conceptos físicos y matemáticos avanzados que hasta ahora solo conocía superficialmente, y me ha dado la oportunidad de enfrentarme por primera vez a una investigación teórica real.

Me ha resultado particularmente interesante el hecho de integrar distintas herramientas matemáticas, computacionales y físicas -tanto conocidas como nuevas- para llegar a un resultado tan preciso, partiendo de formalizar el modelo desde cero.

El estudio de los cristales Rayleigh me ha motivado a seguir por esta vía y a valorar la investigación como camino profesional. Sin duda, ha sido uno de los proyectos más exigentes y, al mismo tiempo, más gratificantes de mi etapa universitaria.

Capítulo 6. FUTURAS LÍNEAS DE TRABAJO

Existen diversas posibles futuras líneas de investigación que podrían beneficiarse del valor de este trabajo, tanto en el ámbito teórico como en aplicaciones tecnológicas.

En primer lugar, se puede considerar que la propia aportación computacional del trabajo abre las puertas al estudio de otros materiales y geometrías de la red de cilindros, ya que el código ha sido generado de forma que es fácil sustituir todos los parámetros utilizados para explorar algunas de las variaciones del problema.

En la línea de las variaciones del problema, es importante destacar que, dentro del modelo de red cuadrada, compuesta por cilindros infinitos dieléctricos, con polarización S, este trabajo ha abordado un caso específico. Se ha tomado el caso de constante dieléctrica independiente de la frecuencia, se ha considerado dispersión isótropa en los cilindros y se han despreciado los efectos de absorción. Por lo que existe una gran cantidad de posibles casos de estudio que surgen de variar las condiciones del cristal de Rayleigh, introduciendo nuevos escenarios como la presencia de campos magnéticos, elementos dispersores asimétricos o materiales anisótropos.

Cabe mencionar que algunos de estos campos específicos ya están siendo estudiados, por ejemplo, el comportamiento de estructuras helicoidales bajo campos magnéticos externos [Lalanne 2007] y la aparición de modos ligados en el continuo (BICs, *Bound states in the continuum*) en cristales fotónicos anisótropos [Shcherbakov 2023]. Sin embargo, muchos de estos avances utilizan un enfoque cuántico o bien se limitan al caso de cristal fotónico general. Por tanto, una posible vía de trabajo sería aplicar una perspectiva clásica de óptica y electromagnetismo o adaptar los resultados al régimen de Rayleigh, en base a lo que se ha hecho en este trabajo.

En el plano práctico, es interesante pensar en los objetivos que quedaron fuera de este trabajo: la elaboración de una configuración experimental, la búsqueda de materiales que puedan implementarse en este área de estudio o el análisis de la viabilidad de los cristales Rayleigh en computación y su integración en circuitos convencionales. Hoy en día estos asuntos representan líneas de investigación activas y con un gran potencial transformador.

Por un lado, la implementación específica de cristales Rayleigh aún requiere estrategias de fabricación que reproduzcan geometrías sub-longitud de onda con precisión, lo cual actualmente es un reto técnico y podría ser una extensión experimental del presente trabajo. Por otro lado, la integración de los cristales Rayleigh en arquitecturas de computación óptica constituye una línea emergente, enmarcada en la tendencia hacia el procesamiento fotónico. Se han propuesto dispositivos basados en cristales fotónicos para operaciones lógicas, memorias ópticas y multiplexación [Notomi 2010], pero el uso de configuraciones Rayleigh en este contexto sigue siendo inexplorado y representa un campo prometedor.

Capítulo 7. REFERENCIAS

Las referencias bibliográficas están identificadas mediante etiquetas en el formato [Apellido Año], correspondientes a la primera entrada de autor y el año de publicación. A continuación, se citan todas las fuentes utilizadas como consulta para elaborar el presente trabajo:

[Albaladejo 2010] Albaladejo, S., et al. (2010). Radiative corrections to the polarizability tensor of an electrically small anisotropic dielectric particle. *Optics Express*, 18(4), 3556–3567. <https://doi.org/10.1364/OE.18.003556>

[Arfken 2013] Arfken, G. B., Weber, H. J., & Harris, F. E. (2013). *Mathematical Methods for Physicists* (7th ed.). Academic Press.

[Asatryan 2001] Asatryan, A. A., Botten, L. C., McPhedran, R. C., de Sterke, C. M., & Nicorovici, N. A. (2001). Two-dimensional Green's function and self-consistent equations for photonic crystals. *Physical Review E*, 63(4), 046612.

[Asatryan 2003] Asatryan, A. A., Botten, L. C., Byrne, M. A., de Sterke, C. M., & McPhedran, R. C. (2003). Complex band structure and dispersion in two-dimensional photonic crystals. *Physical Review E*, 67(5), 056605.

[Ashcroft 1976] Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston.

[Bickel 1980] Bickel, W. S. (1980). *Biophysical applications of scattering theory*

[Bohren 2008] Bohren, C. F., & Huffman, D. R. (2008). *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley-VCH.

[Botten 2001] Botten, L. C., Asatryan, A. A., McPhedran, R. C., Nicorovici, N. A., & de Sterke, C. M. (2001). Transmission and dispersion in photonic crystal slabs. *Physical Review E*, 64(4), 046603.

[Briggs 2000] Briggs, W. L., Henson, V. E., & McCormick, S. F. (2000). *A Multigrid Tutorial* (2ª ed.). SIAM.

[Colton 2013] Colton, D., & Kress, R. (2013). *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory* (3rd ed.). Springer.

[Gómez 2004] Gómez, R. (Mayo 2004). *Interacciones entre luz y partículas pequeñas*, Universidad Autónoma de Madrid.

[Gómez 2006] Gómez, R., Laroche, M., & Sáenz, J. J. (2006). Extraordinary optical reflection from sub-wavelength cylinder arrays. *Optics Express*, 14(9), 3730–3737. <https://doi.org/10.1364/OE.14.003730>

[Haus 1984] Haus, H. A. (1984). *Waves and Fields in Optoelectronics*. Prentice Hall.

- [Herrmann 2003] Herrmann, J. M., Plihal, M., & Soukoulis, C. M. (2003). *Theory of photonic band gap materials*. En Soukoulis, C. M. (Ed.), *Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century* (pp. 1–66). Springer.
- [Hulst 1981] Hulst, H. C. van de (1981). *Light Scattering by Small Particles*. Dover.
- [Joannopoulos 1997] Joannopoulos, J. D., Villeneuve, P. R., & Fan, S. (1997). *Photonic crystals: Putting a new twist on light*, *Nature*, 386, 143-149.
- [Joannopoulos 2008] Joannopoulos, J. D., Meade, R. D., & Winn, J. N. (2008). *Photonic crystals: Molding the flow of light* (2nd ed.). Princeton University Press.
- [John 1987] John, S. (1987). *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*, *Physical Review Letters*, 58(23), 2486-2489.
- [Kim 2018] Kim, S., Taylor, J. M., & Bahl, G. (2018). *Dynamic suppression of Rayleigh light scattering in dielectric resonators*. arXiv preprint arXiv:1803.02366. Disponible en: <https://arxiv.org/abs/1803.02366>
- [Lalanne 2007] Lalanne, P., & Morris, G. M. (2007). *Issues in the Rayleigh expansion method for light scattering by gratings*. *Optics Communications*, 270(2), 236–244. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2006.09.011>
- [Laroche 2006] Laroche, M., et al. (2006). *Tuning the optical response of nanocylinder arrays: An analytical study*. *Physical Review B*, 74(24), 245422. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.245422>
- [Liu 2023] Liu, S., Zhang, L., Guo, X., Sun, C., Xie, S., & Chen, R. (2023). *Three-dimensional photonic-electronic integration for energy-efficient computing and high-bandwidth communication*, arXiv preprint arXiv:2310.01615. Disponible en: <https://arxiv.org/abs/2310.01615>.
- [Martin 1978] Martin, P. A. (1978). *Multiple Scattering: Interaction of Time-Harmonic Waves with N Obstacles*. Cambridge University Press.
- [McPhedran 1999] McPhedran, R. C., Botten, L. C., & Nicorovici, N. A. (1999). *Photonic band structures and complex resonance phenomena in periodic media*. In: C. M. Soukoulis (Ed.), *Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century*. Springer.
- [Mie 1908] Mie, G. (1908). *Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen*. *Ann. Phys.*
- [Morse 1953] Morse, P. M., & Feshbach, H. (1953). *Methods of Theoretical Physics, Part I*. McGraw-Hill.
- [Morse 1968] Morse, P. M. (1968). *Theoretical Acoustics*. Princeton University Press.
- [Navarro-Barón 2015] Navarro-Barón, E. P., et al. (2015). *Cristales fotónicos empleados en tratamientos médicos*, *Avances Investigación en Ingeniería*, 12, 1794-4953.

- [**Nicorovici 1994**] Nicorovici, N. A., McPhedran, R. C., & Milton, G. W. (1994). *Photonic band gaps for arrays of perfectly conducting cylinders*. *Physical Review B*, 49(12), 8479.
- [**Notomi 2010**] Notomi, M. (2010). Manipulating light with strongly modulated photonic crystals. *Reports on Progress in Physics*, 73(9), 096501. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/73/9/096501>
- [**Rayleigh 1881**] Lord Rayleigh F.R.S. (1881) X. *On the electromagnetic theory of light*, *Philosophical Magazine Series 5*, 12:73, 81-101, DOI: 10.1080 /14786448108627074
- [**Sakoda 2001**] Sakoda, K. (2001). *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer.
- [**Saleh 2019**] Saleh, B. E. A., & Teich, M. C. (2019). *Fundamentals of photonics* (3rd ed.). Wiley.
- [**Shcherbakov 2023**] Shcherbakov, M. R., & Alù, A. (2023). Bound states in the continuum in anisotropic photonic crystal slabs. *Scientific Reports*, 13(1), 11234. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-40869-0>
- [**Shifrin 1951**] Shifrin, K. S. (1951). *Scattering of Light in the Atmosphere*.
- [**Stein 2003**] Stein, E. M., & Shakarchi, R. (2003). *Fourier Analysis: An Introduction*. Princeton University Press.
- [**Viktorov 1967**] Viktorov, I. A. (1967). *Rayleigh and Lamb Waves: Physical Theory and Applications*, Ultrasonic Technology Series, Springer.
- [**Watson 1995**] Watson, G. N. (1995). *A Treatise on the Theory of Bessel Functions* (2nd ed.). Cambridge University Press.
- [**Yablonovitch 1987**] Yablonovitch, E. (1987). *Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics*, *Physical Review Letters*, 58(20), 2059-2062.
- [**Yablonovitch 1991**] Yablonovitch, E., & Gmitter, T. J. (1991). *Photonic band structure: The face-centered-cubic case*, *Physical Review Letters*, 67(17), 2295-2298.
- [**Yeh 2005**] Yeh, P. (2005). *Optical Waves in Layered Media* (Vol. 95). Wiley-Interscience.

Capítulo 8. ANEXOS

Este capítulo contiene documentación complementaria al proyecto, donde se incluyen la declaración del uso de herramientas de Inteligencia Artificial, los conceptos necesarios de la teoría formal de *scattering* y el código utilizado en cada sección.

8.1 Uso de Inteligencia Artificial

En la elaboración del presente trabajo, se ha recurrido a herramientas de IA para optimizar el proceso de búsqueda de referencias y generación y mejora de código. Estas herramientas han sido fundamentales para garantizar la calidad y precisión en la presentación de la información.

A continuación, se detalla el uso específico de estas herramientas, garantizando la transparencia y el cumplimiento de los principios éticos en su aplicación:

- Búsqueda de referencias:
 - Herramienta: Consensus.
 - Funciones: búsqueda y síntesis de artículos académicos relevantes que apoyan el marco teórico.
 - Ejemplo de prompt utilizado: *“Provide an overview of studies related to light scattering in Rayleigh crystals”*.
- Generación y mejora de código:
 - Herramienta: ChatGPT-4 Turbo (OpenAI).
 - Funciones: generación de fragmentos de código específicos, resolución de errores computacionales.
 - Ejemplo de prompt utilizado: *“Genera un código de Python que grafique una red plana de puntos equidistantes”*.
 - Comentarios: Se ha seleccionado ChatGPT-4 Turbo para esta tarea frente a otras herramientas similares como Claude 3 (Anthropic), Phind o Google Gemini Pro (Gemini 1.5) por su precisión en el manejo de gráficos complejos soportados por las librerías utilizadas (matplotlib, numpy, shapely, etc.) y capacidad de mantener el contexto a largo plazo.

Cabe destacar que la Inteligencia Artificial ha sido una herramienta de gran apoyo durante el desarrollo del trabajo, pero su utilidad está completamente condicionada al criterio, conocimientos y supervisión de quien la emplea. En otras palabras, generar automáticamente una figura carecería de sentido si yo, como autora original del proyecto, no comprendiera con precisión los conceptos físicos (Capítulo 1) que hay detrás y no estuviera presente para guiar, corregir y ajustar el resultado obtenido.

Por tanto, lejos de sustituir el trabajo intelectual, estas tecnologías han servido como medio para potenciarlo, al tiempo que han contribuido significativamente al desarrollo de mis competencias en el uso de la Inteligencia Artificial.

8.2 Código empleado

A continuación, se detalla el código utilizado para cada sección del trabajo. El lenguaje de programación es Python y la herramienta elegida para la generación y representación de gráficos y esquemas es Jupyter Notebook.

8.2.1 Modelo (Sección 3.2.3)

Código utilizado para la generación de esquemas visuales del cristal bidimensional a considerar.

8.2.1.1 Figura 3-1

```
# Librerías necesarias: Matplotlib (con toolkit 3D) y NumPy
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # habilita gráficos 3D en Matplotlib

# PARÁMETROS
a = 1.5          # Parámetro de red
r = 0.3          # Radio del cilindro
n_x = 6          # Número de cilindros en dirección x
n_y = 5          # Número de cilindros en dirección y
height = 3.0     # Altura del cilindro

# FIGURA Y EJE 3D
fig = plt.figure(figsize=(10, 8)) # Tamaño de la figura
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d') # Crear ejes 3D

# DIBUJAR CILINDRO
def draw_cylinder(x0, y0, r, h, resolution=30):
    """
    Genera un cilindro vertical (eje z) centrado en (x0, y0) con radio r y altura h.
    """
    theta = np.linspace(0, 2 * np.pi, resolution)
    z = np.linspace(0, h, 2)
    theta, z = np.meshgrid(theta, z)
    x = r * np.cos(theta) + x0
    y = r * np.sin(theta) + y0
    ax.plot_surface(x, y, z, color='silver', edgecolor='k', linewidth=0.1)

# GENERAR RED DE CILINDROS
for i in range(n_x):
    for j in range(n_y):
        x = i * a
        y = j * a
        draw_cylinder(x, y, r, height)

# SISTEMA DE EJES COORDENADOS
arrow_length = 2.0 # Longitud de las flechas
origin = [n_x * a + 1.5, -2.0, 0.0] # Origen del sistema
```

```

# Flechas para cada eje
ax.quiver(*origin, arrow_length, 0, 0, color='black', arrow_length_ratio=0.1) # Eje x
ax.text(*(np.array(origin) + [arrow_length + 0.6, 0.8, 0.1]), 'x', fontsize=14)

ax.quiver(*origin, 0, arrow_length, 0, color='black', arrow_length_ratio=0.1) # Eje y
ax.text(*(np.array(origin) + [0, arrow_length - 0.55, -0.35]), 'y', fontsize=14)

ax.quiver(*origin, 0, 0, arrow_length, color='black', arrow_length_ratio=0.1) # Eje z
ax.text(*(np.array(origin) + [0, -0.1, arrow_length + 0.15]), 'z', fontsize=14)

# ENMARCAR LOS EJES

# Límites del marco
rect_x = [origin[0] - 0.5, origin[0] + arrow_length + 0.7]
rect_y = [origin[1] - 0.5, origin[1] + arrow_length + 0.5]
rect_z = [origin[2], origin[2] + arrow_length + 0.5]

# Aristas verticales
for x in rect_x:
    for y in rect_y:
        ax.plot([x, x], [y, y], [rect_z[0], rect_z[1]], color='black',
                linestyle='dotted', linewidth=1)

# Aristas horizontales
for z in rect_z:
    ax.plot([rect_x[0], rect_x[1]], [rect_y[0], rect_y[0]], [z, z], color='black',
            linestyle='dotted', linewidth=1)
    ax.plot([rect_x[0], rect_x[1]], [rect_y[1], rect_y[1]], [z, z], color='black',
            linestyle='dotted', linewidth=1)
    ax.plot([rect_x[0], rect_x[0]], [rect_y[0], rect_y[1]], [z, z], color='black',
            linestyle='dotted', linewidth=1)
    ax.plot([rect_x[1], rect_x[1]], [rect_y[0], rect_y[1]], [z, z], color='black',
            linestyle='dotted', linewidth=1)

# AJUSTES DE ESTILO Y EXPORTACIÓN
ax.set_box_aspect([n_x*a, n_y*a, height]) # Relación de aspecto 3D
ax.view_init(elev=20, azim=35)           # Ángulo de visión 3D: elevación y azimut
ax.grid(False)                           # No cuadrícula
ax.axis('off')                            # Ocultar ejes y ticks

plt.tight_layout()                        # Optimiza uso del espacio

# Exportar imagen PNG (300 dpi)
plt.savefig("figura_3-1.png", dpi=300, bbox_inches='tight')

plt.show()

```

8.2.1.2 Figura 3-2

```

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

```

```

# PARÁMETROS DE LA RED
a = 1.0      # Parámetro de red
r = 0.3      # Radio del cilindro
n = 2        # Dimensión de la red (2x2)

# CREAR FIGURA
fig, ax = plt.subplots(figsize=(6, 6))

# CILINDROS
for i in range(n):
    for j in range(n):
        # círculo centrado en (i*a, j*a) (sección transversal del cilindro)
        circle = plt.Circle((i*a, j*a), r, color='gray', ec='black', lw=1)
        ax.add_patch(circle) # añadir el círculo al eje

# CELDA UNIDAD
square = plt.Rectangle((0, 0), a, a, fill=False, color='black', linestyle='--',
linewidth=1.5)
ax.add_patch(square) # celda cuadrada discontinua

# MARCAR EL RADIO r_0
# flecha doble entre centro (0,0) y punto a distancia r en x
ax.annotate(' ', xy=(0, 0), xytext=(r, 0),
            arrowprops=dict(arrowstyle='<->', lw=1.5))
# etiqueta r_0
ax.text(r/2, 0.05, r'$r_0$', ha='center', va='bottom',
        fontsize=16, fontweight='bold')

# MARCAR DISTANCIA a
center1 = (0, (n-1)*a) # centro cilindro superior izquierdo
center2 = (a, (n-1)*a) # centro cilindro superior derecho

# flecha doble entre centros
ax.annotate(' ', xy=center1, xytext=center2,
            arrowprops=dict(arrowstyle='<->', lw=1.5))
# etiqueta a
ax.text((center1[0] + center2[0]) / 2, center1[1] + 0.1, r'$a$', ha='center',
        fontsize=16, fontweight='bold')

# AJUSTES
ax.set_xlim(-0.6, (n-1)*a + 0.6) # límites horizontales
ax.set_ylim(-0.6, (n-1)*a + 0.6) # límites verticales
ax.set_aspect('equal')           # relación 1:1
ax.axis('off')                   # ocultar ejes y ticks

plt.tight_layout()

# EXPORTAR IMAGEN PNG
plt.savefig("figura_3-2.png", dpi=300, bbox_inches='tight')

plt.show()

```

8.2.1.3 Figura 3-3

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

# PARAMETROS
a = 1
n_points = 5 # Se representan n_points - 1 (4x4)

# RED DIRECTA
def plot_real_lattice(ax):
    for i in range(n_points - 1):
        for j in range(n_points - 1):
            # Círculos -> Cilindros desde arriba
            ax.add_patch(plt.Circle((i*a, j*a), 0.4, color='lightgray', zorder=0))
            ax.plot(i*a, j*a, 'ko', markersize=4, zorder=1)

    # VECTORES PRIMITIVOS
    ax.quiver(0, 0, a, 0, angles='xy', scale_units='xy', scale=1, color='black',
              width=0.015)
    ax.quiver(0, 0, 0, a, angles='xy', scale_units='xy', scale=1, color='black',
              width=0.015)
    ax.text(a*1.2, 0, r'$\vec{u}_x$', fontsize=24)
    ax.text(0, a*1.2, r'$\vec{u}_y$', fontsize=24)

    # AJUSTES
    ax.set_aspect('equal')
    ax.set_xlim(-0.5, n_points - 1)
    ax.set_ylim(-0.5, n_points - 1)
    ax.axis('off')

    # TÍTULO
    x_centro = ((1 + 2) / 2) * a
    y_top = n_points - 1 - 0.1
    ax.annotate('a', xy=(x_centro, y_top), fontsize=28, ha='center')

    # Recuadro negro
    ax.add_patch(plt.Rectangle(
        (-0.5, -0.5), n_points - 1, n_points - 1,
        linewidth=1.5, edgecolor='black', facecolor='none'))

# RED RECÍPROCA
def plot_reciprocal_lattice(ax):
    b = 2 * np.pi / a
    n = n_points - 1

    for i in range(n):
        for j in range(n):
            ax.plot(i*b, j*b, 'ko', markersize=4, zorder=1)

    ax.quiver(0, 0, b, 0, angles='xy', scale_units='xy', scale=1, color='black',
              width=0.015)
```

```

    ax.quiver(0, 0, 0, b, angles='xy', scale_units='xy', scale=1, color='black',
width=0.015)
    ax.text(b*1.2, 0, r'\frac{2\pi}{a}\vec{u}_x$', fontsize=24)
    ax.text(0, b*1.2, r'\frac{2\pi}{a}\vec{u}_y$', fontsize=24)

    ax.set_aspect('equal')
    ax.set_xlim(-0.5*b, (n - 1 + 1)*b)
    ax.set_ylim(-0.5*b, (n - 1 + 1)*b)
    ax.axis('off')

    x_centro = ((1 + 2) / 2) * b
    y_top = (n - 1 + 1)*b - 0.1
    ax.annotate('b)', xy=(x_centro, y_top), fontsize=28, ha='center')

    ax.add_patch(plt.Rectangle(
        (-0.5*b, -0.5*b), (n - 1 + 1)*b, (n - 1 + 1)*b,
        linewidth=1.5, edgecolor='black', facecolor='none'))

# CREAR Y GUARDAR IMAGEN
fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 6))
plot_real_lattice(axs[0])
plot_reciprocal_lattice(axs[1])
plt.tight_layout()
plt.savefig("figura_3-3.png", dpi=300, bbox_inches='tight')
plt.show()

```

8.2.2 Introducción teórica (Sección 4.1)

8.2.2.1 Figura 3-4

```

# Necesario tener instalado shapely
# pip install shapely

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from shapely.geometry import LineString, Point
from shapely.ops import polygonize, unary_union

# a) Primeras 8 zonas de Brillouin
a = 1
b = 2 * np.pi / a
n = 5
x = np.arange(-n, n + 1) * b
y = np.arange(-n, n + 1) * b
Xg, Yg = np.meshgrid(x, y)
points = np.column_stack([Xg.ravel(), Yg.ravel()])
origin = np.array([0, 0])

lines = []
for p in points:
    if np.all(p == origin):

```

```

        continue
    mid = (p + origin) / 2
    direction = p - origin
    normal = np.array([-direction[1], direction[0]])
    normal = normal / np.linalg.norm(normal)
    far = 3 * b
    p1 = mid + normal * far
    p2 = mid - normal * far
    lines.append(LineString([p1, p2]))

merged = unary_union(lines)
regions = list(polygonize(merged))

def brillouin_zone(region, origin, lines):
    center = region.representative_point()
    return sum(line.crosses(LineString([origin, center])) for line in lines)

zone_map = {}
for region in regions:
    zone = brillouin_zone(region, Point(origin), lines)
    if zone not in zone_map:
        zone_map[zone] = []
    zone_map[zone].append(region)

zonal = min(regions, key=lambda r: r.centroid.distance(Point(origin)))

colores = [
    "#91c4f2", "#b9e3c6", "#f9d28c", "#f2a1a1",
    "#d6b5f2", "#f7c9e3", "lavender", "#dddddd",
]

# b) Direcciones de simetría en la 1ª ZB
l = 2 * np.pi
half_l = l / 2
Gamma = np.array([0, 0])
X = np.array([half_l, 0])          # Punto X
X_arrow = np.array([l, 0])        # Extremo de la flecha horizontal
Y = np.array([0, l])
M = np.array([half_l, half_l])
azul_marino = "#0a2f5c"
num_lines = 4

# FIGURA TOTAL
fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(13.5, 6))

# FIGURA a)
ax = axs[0]
patch = np.array(zonal.exterior.coords)
ax.fill(*patch.T, color=colores[0], edgecolor='black', linewidth=0.5)
zona_usada = {zonal.wkt}
color_idx = 1
for zone in range(1, 8):

```

```

    if zone in zone_map:
        for region in zone_map[zone]:
            if region.wkt in zona_usada:
                continue
            patch = np.array(region.exterior.coords)
            ax.fill(*patch.T, color=colores[color_idx], edgecolor='black',
linewidth=0.5)
            if color_idx < len(colores) - 1:
                color_idx += 1
for line in lines:
    x, y = line.xy
    ax.plot(x, y, color='black', linewidth=0.5, alpha=0.3)
ax.plot(points[:, 0], points[:, 1], 'ko', markersize=2)
lim = b * (n + 0.5)
ax.set_xlim(-lim, lim)
ax.set_ylim(-lim, lim)
ax.set_aspect('equal')
ax.axis('off')
ax.text(0, lim + 2.7, 'a', fontsize=28, ha='center')
ax.add_patch(plt.Rectangle((-lim, -lim), 2 * lim, 2 * lim,
linewidth=1.5, edgecolor='black', facecolor='none'))

# FIGURA b)
ax = axs[1]
grid_range = np.arange(-2 * l, 2.5 * l, l)
for xg in grid_range:
    for yg in grid_range:
        ax.plot(xg, yg, 'ko', markersize=4)

# 1a zona de Brillouin
ax.add_patch(plt.Rectangle(
    (-half_l, -half_l), l, l,
    facecolor="#91c4f2", edgecolor='black', linewidth=1.5, zorder=1
))

# Líneas discontinuas
x_hmax = 2.6 * l
for i in range(-num_lines, num_lines + 1):
    y_line = half_l + i * l
    ax.plot([-1.5 * l, x_hmax], [y_line, y_line], linestyle='--', color='black',
zorder=1)
for i in range(-num_lines, num_lines + 1):
    x_line = half_l + i * l
    ax.plot([x_line, x_line], [-2 * l, 2.5 * l], linestyle='--', color='black',
zorder=1)

# Flechas
ax.annotate("", xy=X_arrow, xytext=Gamma,
            arrowprops=dict(arrowstyle="->", lw=1.5, color='black'), zorder=2)
ax.annotate("", xy=Y, xytext=Gamma,
            arrowprops=dict(arrowstyle="->", lw=1.5, color='black'), zorder=2)

```

```
# Etiquetas
ax.text(Gamma[0] - 1.1, Gamma[1], r'$\Gamma$', fontsize=24, va='center', zorder=3)
ax.text(M[0] + 0.75, -1.5, r'$X$', fontsize=24, ha='center', zorder=3)
ax.text(M[0] + 0.4, M[1] + 0.25, r'$M$', fontsize=24, zorder=3)
ax.text(X_arrow[0] + 0.4, -0.3, r'$\frac{2\pi}{a}$', fontsize=24, zorder=3)
ax.text(0.5, Y[1] + 0.4, r'$\frac{2\pi}{a}$', fontsize=24, zorder=3)

# Puntos Gamma, X, M
ax.plot(*Gamma, 'o', markersize=6, color=azul_marino, zorder=4)
ax.plot(*X, 'o', markersize=6, color=azul_marino, zorder=4)
ax.plot(*M, 'o', markersize=6, color=azul_marino, zorder=4)

# Ajustes figura b
ax.set_xlim(-1.2 * l, 2.6 * l)
ax.set_ylim(-1.8 * l, 2.2 * l)
ax.set_aspect('equal')
ax.axis('off')
ax.text(0.7 * l, 2.5 * l - 0.5, 'b', fontsize=28, ha='center')
ax.add_patch(plt.Rectangle(
    (-1.2 * l, -1.8 * l), 3.8 * l, 4 * l,
    linewidth=1.5, edgecolor='black', facecolor='none'
))

# GUARDAR IMAGEN
plt.tight_layout()
plt.savefig("figura_3-4.png", dpi=300, bbox_inches='tight')
plt.show()
```

8.2.2.2 Figura 4-1

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

# CRISTAL 1-D
def draw_1d(ax):
    for i in range(8):
        color = 'lightgray' if i % 2 == 0 else 'dimgray'
        ax.bar3d(i, 0, 0, 1, 8, 8, color=color, shade=True)
    ax.set_title('1-D', fontsize=16)
    ax.set_xlim(0, 8)
    ax.set_ylim(0, 8)
    ax.set_zlim(0, 8)
    ax.axis('off')

# CRISTAL 2-D
def draw_2d(ax):
    for i in range(8):
        for j in range(8):
            color = 'lightgray' if (i + j) % 2 == 0 else 'dimgray'
            ax.bar3d(i, j, 0, 1, 1, 8, color=color, shade=True)
```

```

ax.set_title('2-D', fontsize=16)
ax.set_xlim(0, 8)
ax.set_ylim(0, 8)
ax.set_zlim(0, 8)
ax.axis('off')

# CRISTAL 3-D
def draw_3d(ax):
    for i in range(8):
        for j in range(8):
            for k in range(8):
                color = 'lightgray' if (i + j + k) % 2 == 0 else 'dimgray'
                ax.bar3d(i, j, k, 1, 1, 1, color=color, shade=True)
ax.set_title('3-D', fontsize=16)
ax.set_xlim(0, 8)
ax.set_ylim(0, 8)
ax.set_zlim(0, 8)
ax.axis('off')

# GRÁFICO Y SUBGRÁFICOS
fig = plt.figure(figsize=(15, 5))

ax1 = fig.add_subplot(131, projection='3d')
draw_1d(ax1)

ax2 = fig.add_subplot(132, projection='3d')
draw_2d(ax2)

ax3 = fig.add_subplot(133, projection='3d')
draw_3d(ax3)

plt.tight_layout()

# GUARDAR IMAGEN
plt.savefig("figura_4-1.png", dpi=300, bbox_inches='tight')
plt.show()

```

8.2.3 Convergencia de la ecuación de bandas (Sección 4.2.2)

8.2.3.1 Figura 4-2

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.special import j1, y1

# PARAMETROS
rho_rel = 0.85 # rho_rel = rho/a, se elige este valor para mejor visualizacion
N_continuo = 10 # Número de términos para la línea continua
x_vals = np.linspace(0.05, 0.91, 1000) # x = omega a / 2pi c

```

```
# FUNCION PARA CALCULAR  $-1/4 \operatorname{Im}\{S_0(x)\}$  para un valor dado de N
def calcular_ImS0_4(x_array, N):

    # Se generan los  $K_h = (2\pi/a)(h_1, h_2)$ 
    h_vals = np.arange(-N, N + 1)
    h1, h2 = np.meshgrid(h_vals, h_vals)
    h1 = h1.flatten()
    h2 = h2.flatten()

    # Se asume  $K=0$ 
    #  $Q_h = |K_h| = \sqrt{h_1^2 + h_2^2}$ 
    K_h = np.sqrt(h1**2 + h2**2)
    K_h[K_h == 0] = 1e-10

    # Función de Bessel  $J_1(2 \pi K_h)$ 
    J1_Kha = j1(2 * np.pi * K_h)

    # Vector vacío para almacenar los resultados
    ImS0_4 = np.zeros_like(x_array)

    for i, x in enumerate(x_array):

        # Sumatorio:  $\sum [1/Q_h] * [J_1(Q_h a) / (Q_h^2 - (\omega/c)^2)]$ 
        # Denominador:  $K_h^2 - (x)^2$ 
        denom = K_h**2 - x**2
        denom[np.abs(denom) < 1e-10] = 1e-10 # Evitar división por cero
        sum_term = np.sum((1 / K_h) * (J1_Kha / denom)) # con numpy, evitar otro bucle

        # Función de Neumann  $N_1(2 \pi x)$ 
        N1_omegaa_c = y1(2 * np.pi * x)

        # Factor suelto
        correction_term = 1 / (4 * np.pi**2 * x)

        # Valor total sin dividir por  $J_1(2 \pi \rho' x)$ 
        total_sum = N1_omegaa_c + correction_term + (x / (4 * np.pi**2)) * sum_term

        # Función de Bessel  $J_1(2 \pi \rho' x)$ 
        J1_omegarho_c = j1(2 * np.pi * rho_rel * x)
        epsilon = 1e-10 # tolerancia

        #  $-\operatorname{Im}(S_0)/4$ 
        ImS0_4[i] = total_sum / (J1_omegarho_c + epsilon * np.sign(J1_omegarho_c))
    return ImS0_4

# CURVA CONTINUA
ImS0_4_continuo = calcular_ImS0_4(x_vals, N=N_continuo)

# CURVAS  $N = 3$  y  $N = 18$ 
x_vals_sparse = np.linspace(0.05, 0.91, 40) # 40 puntos
ImS0_4_N3 = calcular_ImS0_4(x_vals_sparse, N=3)
ImS0_4_N18 = calcular_ImS0_4(x_vals_sparse, N=18)
```

```
# GRÁFICA
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 5))
ax.plot(x_vals, ImS0_4_continuo, color='black', linewidth=1)

# N = 3: Círculos
ax.scatter(x_vals_sparse, ImS0_4_N3, facecolors='black', edgecolors='white',
           marker='o', s=45, zorder=3, label='N = 3 (121 términos)')

# N = 18: Cuadrados
ax.scatter(x_vals_sparse, ImS0_4_N18, facecolors='none', edgecolors='black',
           marker='s', s=85, linewidths=1.5, zorder=4, label='N = 18 (1369 términos)')

# EJES Y FORMATO
ax.set_xlim(0.05, 0.911)
ax.set_ylim(-80, 80)
ax.set_xticks(np.linspace(0.1, 0.9, 9))
ax.set_xlabel(r"$\omega a / 2\pi c$", fontsize=12)
ax.set_ylabel(r"$-\frac{1}{4} \Im \{S_0(x)\}$", fontsize=12)
ax.axhline(0, color='gray', linestyle='--', linewidth=0.8)
ax.legend(fontsize=10)
ax.grid(False)

# GUARDAR IMAGEN
plt.tight_layout()
plt.savefig("figura_4-2.png", dpi=300, bbox_inches='tight')
plt.show()
```

8.2.4 Estructura de bandas (Sección 4.3)

8.2.4.1 Figura 4.3

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.special import j1, y1

# Parámetros
epsilon1 = 1
epsilon2 = 11.9
delta_eps = epsilon2/epsilon1 - 1
alpha = 1
rho_rel = 1.01
N = 15
x_vals = np.linspace(0.01, 1.0, 1000) # evitamos x = 0

def calcular_ImS0_con_K(x_array, Kx, Ky):
    h_vals = np.arange(-N, N+1)
    h1, h2 = np.meshgrid(h_vals, h_vals)
    h1 = h1.flatten()
```

```

h2 = h2.flatten()

Qx = h1 + Kx
Qy = h2 + Ky
Q_h = np.sqrt(Qx**2 + Qy**2)
Q_h[Q_h == 0] = 1e-10

ImS0_4 = np.zeros_like(x_array)

for i, x in enumerate(x_array):

    denom = Q_h**2 - x**2
    denom[np.abs(denom) < 1e-10] = 1e-10
    J1_Qha = j1(2 * np.pi * Q_h)
    sum_term = np.sum((1 / Q_h) * (J1_Qha / denom))
    H1=hankell(1,2 * np.pi * x)/4
    correction_term = 1 / (4 * np.pi**2 * x)
    total_sum = H1 + 1j * (correction_term + (x / (4 * np.pi**2)) * sum_term)
    J1_rho = j1(2 * np.pi * rho_rel * x)
    epsilon = 1e-8 # tolerancia
    # -Im(S_0)/4
    ImS0_4[i] = np.imag(total_sum / (J1_rho + epsilon * np.sign(J1_rho)))

return ImS0_4

# Evaluamos para K=M
Kx, Ky = 0.5, 0.5
Im_vals = calcular_ImS0_con_K(x_vals, Kx, Ky)

# Eliminamos NaNs para evitar cortes visuales
mask = ~np.isnan(Im_vals)
x_vals_clean = x_vals[mask]
Im_vals_clean = Im_vals[mask]

# Gráfico completo
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(x_vals_clean, Im_vals_clean, label=r"$-\frac{1}{4} \Im S_0(x)$", color='black',
linewidth=2)
plt.xlabel(r"$x = \omega a / 2\pi c$", fontsize=12)
plt.ylabel(r"$-\Im S_0/4$", fontsize=12)
plt.xlim(0, 1)
plt.ylim(-1, 1)
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
plt.legend()

# Guardar figura
plt.tight_layout()
plt.savefig("figura_4-3.png", dpi=300, bbox_inches='tight')
plt.show()

```

8.2.4.2 Figura 4.4

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Vectores de la zona de Brillouin
pi_a = np.pi
p_Gamma = (0, 0)
p_X = (pi_a, 0)
p_M = (pi_a, pi_a)

# FIGURA
fig, ax = plt.subplots(figsize=(5, 5))

# 1ª ZONA DE BRILLOUIN
L = pi_a
square = plt.Rectangle((-L, -L), 2*L, 2*L, fill=False, linestyle='--', linewidth=1)
ax.add_patch(square)

# RECORRIDO  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$ 
camino = [p_Gamma, p_X, p_M, p_Gamma]
camino = np.array(camino)
ax.plot(camino[:,0], camino[:,1], color='blue', linewidth=1.5)

# Añadir flechas en cada segmento
for i in range(len(camino)-1):
    start = camino[i]
    end = camino[i+1]
    dx, dy = end[0] - start[0], end[1] - start[1]
    ax.arrow(start[0], start[1], dx, dy, head_width=0.15, head_length=0.15, fc='blue',
ec='blue', length_includes_head=True)

# Etiquetar puntos de alta simetría
ax.text(p_Gamma[0]-0.2, p_Gamma[1]-0.2, r'$\Gamma$', fontsize=14)
ax.text(p_X[0]+0.1, p_X[1]-0.1, r'$X$', fontsize=14)
ax.text(p_M[0]+0.1, p_M[1]+0.1, r'$M$', fontsize=14)

# AJUSTES DEL GRÁFICO
ax.set_xlim(-1.2*L, 1.2*L)
ax.set_ylim(-1.2*L, 1.2*L)
ax.set_aspect('equal')
ax.set_xlabel(r'$k_x$', fontsize=12)
ax.set_ylabel(r'$k_y$', fontsize=12)
ax.grid(False)
ax.set_xticks([])
ax.set_yticks([])

# Guardar figura
plt.tight_layout()
plt.savefig("figura_4-4.png", dpi=300, bbox_inches='tight')
plt.show()
```

8.2.4.3 Figura 4.5

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.special import j1, hankell1
from sklearn.linear_model import RANSACRegressor

# Parámetros
epsilon1 = 1 # medio externo
epsilon2 = 11.9 # cilindro
delta_eps = epsilon2 / epsilon1 - 1
rho_rel = 1
N = 15
x_vals = np.linspace(0.01, 1.0, 1000)

# Función  $Re(1/4\pi f)$ 
def calcular_Reinv_4pif(x, alpha):
    u = 2 * np.pi * alpha * x
    fourpi_f = (np.pi * u**2 * delta_eps) / (1 - 1j * np.pi * (u/2)**2 * delta_eps)
    return np.real(1 / fourpi_f)

# Función  $-Im(S_0)/4$ 
def calcular_ImS0_con_K(x_array, Kx, Ky):
    h_vals = np.arange(-N, N+1)
    h1, h2 = np.meshgrid(h_vals, h_vals)
    h1 = h1.flatten()
    h2 = h2.flatten()
    Qx = h1 + Kx
    Qy = h2 + Ky
    Q_h = np.sqrt(Qx**2 + Qy**2)
    Q_h[Q_h == 0] = 1e-10

    ImS0_4 = np.zeros_like(x_array)
    for i, x in enumerate(x_array):
        denom = Q_h**2 - x**2
        denom[np.abs(denom) < 1e-10] = 1e-10
        J1_Qha = j1(2 * np.pi * Q_h)
        sum_term = np.sum((1 / Q_h) * (J1_Qha / denom))
        H1 = hankell1(1, 2 * np.pi * x) / 4
        correction_term = 1 / (4 * np.pi**2 * x)
        total_sum = H1 + 1j * (correction_term + (x / (4 * np.pi**2)) * sum_term)
        J1_rho = j1(2 * np.pi * rho_rel * x)
        epsilon = 1e-8
        ImS0_4[i] = np.imag(total_sum / (J1_rho + epsilon * np.sign(J1_rho)))
    return ImS0_4

# Recorrido de  $K: \Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$ 
def generar_camino_K(puntos, pasos_por_tramo):
    camino = []
    for i in range(len(puntos) - 1):
        inicio = np.array(puntos[i])
        fin = np.array(puntos[i + 1])
```

```

        tramo = np.linspace(inicio, fin, pasos_por_tramo, endpoint=False)
        camino.append(tramo)
    camino.append(np.array([puntos[-1]]))
    return np.concatenate(camino)

# RANSAC múltiple
def eliminar_bandas_rectas_ransac(ks, xs, repeticiones=3, tolerancia=0.005):
    ks = np.array(ks)
    xs = np.array(xs)
    for _ in range(repeticiones):
        if len(ks) < 10:
            break
        modelo = RANSACRegressor(residual_threshold=0.0028, random_state=59)
        # sobre la semilla del generador aleatorio: utilizar random_state=59 para
        # obtener el resultado más similar
        ks_reshape = ks.reshape(-1, 1)
        modelo.fit(ks_reshape, xs)
        xs_pred = modelo.predict(ks_reshape)
        residuo = np.abs(xs - xs_pred)
        mascara = residuo > tolerancia
        ks = ks[mascara]
        xs = xs[mascara]
    return ks, xs

# Direcciones de alta simetría
p_Gamma = (0.0, 0.0)
p_X = (0.5, 0.0)
p_M = (0.5, 0.5)
puntos_simetria = [p_Gamma, p_X, p_M, p_Gamma]
camino_K = generar_camino_K(puntos_simetria, pasos_por_tramo=40)
num_pasos = len(camino_K)

# Representar distintos radios
alphas = [0.01, 0.04, 0.09, 0.18]
fig, axs = plt.subplots(2, 2, figsize=(10, 10))
axs = axs.flatten()

for idx, alpha in enumerate(alphas):
    Re_vals = calcular_Reinv_4pif(x_vals, alpha)
    soluciones_x = []

    for i, (Kx, Ky) in enumerate(camino_K):
        Im_vals = calcular_ImS0_con_K(x_vals, Kx, Ky)
        diferencia = Im_vals - Re_vals
        signos = np.sign(diferencia)
        cambios = np.where(np.diff(signos))[0]
        for idx_cambio in cambios:
            x1, x2 = x_vals[idx_cambio], x_vals[idx_cambio + 1]
            y1_, y2_ = diferencia[idx_cambio], diferencia[idx_cambio + 1]
            if y2_ - y1_ == 0:
                continue
            x_corte = x1 - y1_ * (x2 - x1) / (y2_ - y1_)

```

```

    soluciones_x.append((i, x_corte))

ks_plot = np.array([k for k, x in soluciones_x])
xs_plot = np.array([x for k, x in soluciones_x])

if alpha > 0.01:
    ks_plot, xs_plot = eliminar_bandas_rectas_ransac(ks_plot, xs_plot)

ax = axs[idx]
ax.scatter(ks_plot, xs_plot, color='black', s=6)
ax.set_xticks([0, 40, 80, 120])
ax.set_xticklabels([r'$\Gamma$', r'$X$', r'$M$', r'$\Gamma$'])
ax.set_xlim(0, num_pasos - 1)
ax.set_ylim(0.15, 0.8)
ax.set_title(f"$\alpha = \{alpha\}$", fontsize=12)
ax.grid(True, linestyle='--', alpha=0.4)

axs[0].set_ylabel(r"$\omega a / 2\pi c$", fontsize=12)
axs[2].set_ylabel(r"$\omega a / 2\pi c$", fontsize=12)
axs[2].set_xlabel(r"$\vec{K}$", fontsize=12)
axs[3].set_xlabel(r"$\vec{K}$", fontsize=12)

# Guardar figura
plt.tight_layout()
plt.savefig("figura_4-5.png", dpi=300, bbox_inches='tight')
plt.show()

```

8.3 Teoría formal de Scattering

La teoría de scattering constituye un marco formal fundamental para comprender la interacción de ondas o partículas con estructuras o medios materiales, encontrando aplicación en un abanico extremadamente amplio de disciplinas científicas y tecnológicas. Desde la acústica [Martin 1978] hasta la biofísica [Bickel 1980] y la meteorología [Shifrin 1951], el fenómeno de dispersión ha sido analizado mediante distintas formulaciones teóricas adaptadas a las particularidades de cada campo [Morse, 1968].

Esta diversidad ha conducido a un desarrollo paralelo de notaciones, modelos y formalismos, donde, por ejemplo, los físicos suelen describir el scattering en términos de excitaciones elementales como fonones o plasmones [Gómez 2004], mientras que los ingenieros optan por enfoques orientados a la caracterización de dispositivos o señales [Haus 1984].

8.3.1 Amplitud de scattering

El fenómeno de scattering puede definirse como el proceso mediante el cual una perturbación incidente (ya sea una onda plana, una partícula o un haz electromagnético) interacciona con una región espacial limitada, modificando su propagación y generando una onda dispersada.

Una condición universal en los problemas de dispersión es el comportamiento asintótico del campo dispersado, que se aproxima a una onda divergente generada por una fuente puntual localizada en la región dispersora. En el caso tridimensional, si la onda incidente es plana, la solución total se descompone en la onda incidente más un campo dispersado que, a grandes distancias, adopta la forma:

Ecuación 8.1

$$\varphi^{sc} \sim 4\pi f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{4\pi r}$$

Donde $f(\theta, \phi)$ es la amplitud de scattering, función que caracteriza cómo la onda es redistribuida en las distintas direcciones a partir de la interacción. El término $4\pi f(\theta, \phi)$ recibe también el nombre de factor de distribución angular, ya que contiene la dependencia direccional de la dispersión.

Esta magnitud depende de la dirección (θ, ϕ) a no ser que se trate de scattering isótropo, como es el caso de este trabajo, entonces la onda dispersada se distribuye de manera uniforme en todas las direcciones espaciales y es de mayor interés su relación con las propiedades espectrales de la onda incidente, de manera que [Bohren 2008]:

$$f = f(\omega)$$

8.3.2 Desarrollo de Mie para pequeños cilindros

La teoría de Mie adaptada a cilindros pequeños constituye un caso paradigmático en el estudio de la dispersión de luz por partículas dieléctricas con simetría cilíndrica. Este caso permite obtener soluciones analíticas a partir de la expansión del campo dispersado en armónicos cilíndricos [Mie 1908].

Cuando se conoce el campo dispersado por un cilindro, la amplitud de scattering en dos dimensiones se obtiene comparando la expresión asintótica del campo con la forma esperada a grandes distancias [Gómez 2004]:

Ecuación 8.2

$$\varphi^{sc}(\vec{\rho}) \sim \varphi^0 \cdot 4\pi f(\phi) \cdot \lim_{\rho \rightarrow \infty} g_0(\rho, a)$$

donde $f(\phi)$ es la amplitud de scattering bidimensional, φ^0 es la amplitud de la onda incidente y g_0 es una función de Green. A partir de la expansión del campo dispersado en funciones de Bessel y Hankel [Gómez 2004], se obtiene que la amplitud puede expresarse como:

Ecuación 8.3

$$4\pi f^{[s,p]}(\vec{k}_i, \vec{k}) = 4i \left\{ c_0^{[s,p]} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} c_m^{[s,p]} \cos(m\phi) \right\}$$

Donde $c_m^{[s,p]}$ son los coeficientes de la expansión en armónicos cilíndricos, que dependen de la polarización (S o P) y de los parámetros relacionados con el material y la geometría del sistema.

8.3.3 Aproximación de partícula pequeña

Al estar estudiando un cristal Rayleigh, interesa el límite en que el tamaño del cilindro r_0 es mucho menor que la longitud de onda incidente λ . En este régimen, se puede truncar la expansión en armónicos cilíndricos conservando solo los primeros términos, normalmente $m = 0, 1$ [Hulst 1981]. De forma que el comportamiento del campo dispersado pasa a estar dominado por los coeficientes de orden bajo, lo que permite simplificar los cálculos significativamente [Gómez 2004].

En particular, se puede demostrar que para la polarización S y cuando se trata de un cilindro dieléctrico permeable, el scattering es, como se ha mencionado antes, aproximadamente isótropo:

Ecuación 8.4

$$4\pi f^{[s]}(\vec{k}_i, \vec{k}) \approx 4ic_0^{[s]}$$

lo que implica que la dispersión no depende del ángulo ϕ , y el patrón de radiación es simétrico. En cambio, si el cilindro presentara contraste magnético o se considera la polarización P, aparecería una dependencia angular a primer orden, lo que introduciría anisotropías en la dispersión [Gómez 2004].

En la aproximación de partícula pequeña, el coeficiente $c_0^{[s]}$, correspondiente al modo monopolar, se puede expandir en series de potencias de $x = kr_0$. Bajo esta expansión se encuentra que:

Ecuación 8.5

$$c_0^{[s]} \approx \pi \left(\frac{kr_0}{2} \right)^2 \left(1 - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right) \left\{ 1 + i\pi \left(\frac{kr_0}{2} \right)^2 \left(1 - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right) \right\}$$

Donde r_0 es el radio del cilindro y ε_1 y ε_2 son las constantes dieléctricas del medio exterior y del cilindro, respectivamente.

Una forma alternativa de realizar este cálculo es mediante la polarizabilidad α^E :

Ecuación 8.6

$$\alpha^E = \frac{1}{k^2} 4\pi f$$

Donde, realizando la misma aproximación de partícula pequeña, se tiene que:

Ecuación 8.7

$$\alpha^E \equiv \alpha_{zz} = \frac{\pi r_0^2 \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} - 1 \right)}{1 - i\pi \left(\frac{kr_0}{2} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} - 1 \right)}$$

[PÁGINA INTENCIONADAMENTE EN BLANCO]