

*Facultad  
de  
Ciencias*

**DISEÑO Y CARACTERIZACIÓN  
DE UN BIOSENSOR QUIRAL  
NANOFOTÓNICO  
SINTONIZABLE**

(DESIGN AND CHARACTERISATION OF A TUNABLE  
CHIRAL NANOPHOTONIC BIOSENSOR)

Trabajo Fin de Grado para acceder al

**GRADO EN FÍSICA**

Autora: Nerea García Santalla

Director: Pablo Albella Echave

Julio - 2025



---

## AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer primero a mi tutor, Pablo, por su trato cercano y su total disponibilidad.

También a mi familia, en especial a mis padres; que han confiado en mí, y en mi capacidad de trabajo, animándome sobre todo en los momentos de desánimo, que también los ha habido.

A mis amigas de aquí, de Santander, con las que he formado un gran equipo desde que empezamos la carrera. Gracias a mi compañera de piso, Yolanda, por ser testigo de las infinitas horas que he dedicado a este TFG y transmitirme esa felicidad día a día.

Finalmente a mis compañeras de gimnasia rítmica, las "Irunesas", por ser mi vía de escape durante estos cuatro años y alegrarme semana tras semana.

A todos, mil gracias.

---

## Resumen

El presente Trabajo Fin de Grado aborda el diseño y caracterización de un biosensor quiral nanofotónico sintonizable, con el objetivo de mejorar la detección de enantiómeros en el sector farmacéutico y biomédico. La quiralidad, propiedad geométrica que impide la superposición de un objeto con su imagen especular, es de gran relevancia, ya que los enantiómeros de una molécula pueden exhibir propiedades biológicas y farmacológicas distintas. En este trabajo, se estudia la respuesta electromagnética de sistemas quirales para potenciar su respuesta óptica.

El proyecto se centra en el diseño de nanoestructuras, como esferas y discos con aperturas, utilizando materiales como silicio, germanio y fosfuro de galio. Se emplean simulaciones numéricas mediante el método FDTD (Finite Difference Time-Domain) para analizar la interacción luz-materia y las resonancias, con el objetivo de aprender a utilizar estos algoritmos y aprender la física que conllevan. Los resultados muestran que las resonancias varían con el material y la geometría, permitiendo sintonizar la respuesta quiral. Además, se propone una estructura tipo Janus, combinando silicio y fosfuro de galio, con idea de amplificar el dicroísmo circular y ampliar el ancho de banda (*broadband*), optimizando la sensibilidad del biosensor.

**Palabras clave:** nanofotónica, quiralidad, biosensor, dicroísmo circular, broadband

## Abstract

This Final Degree Project addresses the design and characterization of a tunable chiral nanophotonic biosensor, aiming to improve the detection of enantiomers in the pharmaceutical and biomedical sectors. Chirality, a geometric property that prevents the superposition of an object with its mirror image, is highly relevant, as the enantiomers of a molecule can show different biological and pharmacological properties. In this work, the electromagnetic response of chiral systems is studied to maximize their optical response.

The project focuses on the design of nanostructures, such as spheres and discs with apertures, using materials like silicon, germanium, and gallium phosphide. Numerical simulations are used, by the FDTD (Finite Difference Time-Domain) method to analyze light-matter interactions and resonances, with the goal of learning these algorithms and understanding the underlying physics. The results show that resonances vary with the material and geometry, allowing the chiral response to be tuned. Additionally, a Janus-type structure is proposed, combining silicon and gallium phosphide, with the aim of amplifying circular dichroism and broadening the bandwidth (*broadband*), optimizing the sensitivity of the biosensor.

**Keywords:** nanophotonics, chirality, biosensor, circular dichroism, broadband

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>7</b>
1.1. Nanofotónica . . . . .	7
1.2. Objetivos y motivación . . . . .	7
1.3. Estructura de la memoria . . . . .	8
<b>2. Óptica y electromagnetismo</b>	<b>9</b>
2.1. Ecuaciones de Maxwell en el vacío . . . . .	9
2.2. Luz como onda electromagnética . . . . .	10
2.3. Polarización de la luz . . . . .	13
<b>3. Luz-materia</b>	<b>17</b>
3.1. Materia . . . . .	17
3.2. Ecuaciones de Maxwell en medios materiales . . . . .	17
3.3. Propiedades de la materia . . . . .	18
3.4. Modelos de interacción . . . . .	19
3.4.1. Modelo de Lorentz . . . . .	19
3.4.2. Modelo de Drude . . . . .	20
3.5. Respuesta electromagnética de nanoestructuras . . . . .	21
3.5.1. Respuesta de campo lejano . . . . .	22
3.5.2. Respuesta de campo cercano . . . . .	24
<b>4. Quiralidad</b>	<b>27</b>
4.1. Concepto de quiralidad . . . . .	27
4.2. Formalismo de Tang-Cohen . . . . .	28
4.2.1. Formalismo de Tang-Cohen para onda plana . . . . .	30
4.3. Aplicaciones biológicas . . . . .	30
<b>5. Resolución numérica: FDTD</b>	<b>33</b>
<b>6. Resultados y discusión</b>	<b>37</b>
6.1. Esferas . . . . .	37
6.2. Discos . . . . .	38
6.3. Discos con aperturas . . . . .	40
6.4. Discos dobles . . . . .	42

<b>7. Conclusiones y trabajo futuro</b>	<b>47</b>
7.1. Conclusiones . . . . .	47
7.2. Trabajo futuro . . . . .	48
<b>A. Teoría de Mie</b>	<b>53</b>
A.1. Solución general . . . . .	53
A.2. Aproximación para esferas pequeñas . . . . .	54

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Nanofotónica

La nanofotónica es un campo dentro de la física que estudia la interacción de la luz con la materia a escalas nanométricas. Esta interacción luz-materia a nanoescala revela fenómenos únicos que ocurren cuando la longitud de onda de la luz aplicada y el tamaño de la estructura estudiada son del mismo tamaño. Por esta razón, se está convirtiendo en un área de gran interés en estos últimos años [1–4]. De este modo, la nanofotónica tiene un gran número de aplicaciones en ámbitos como telecomunicaciones, medicina, computación y biotecnología [5]. A continuación se destacan algunas de ellas:

En este campo de la nanofotónica se hallan las nanoantenas, que son estructuras diseñadas para interactuar con la luz en la escala nanométrica (lo cual no se puede conseguir con espejos y lentes debido al límite de difracción) [6].

Cabe destacar entre las aplicaciones médicas, la eliminación de tumores cancerígenos mediante nanopartículas de oro. Cuando estas nanopartículas se excitan con luz, producen resonancias plasmónicas y generan calor local, destruyendo así la célula a la que se adhieren [7].

Este trabajo se centra en uno de los avances más significativos de la nanofotónica: la **quiralidad**. Es una propiedad que se refiere a los objetos que no pueden ser superponibles con su imagen en un espejo. Si estos objetos son nanométricos, su interacción con la luz es diferente entre los enantiómeros (las dos configuraciones de un objeto quiral).

### 1.2. Objetivos y motivación

El objetivo principal es estudiar nanoestructuras capaces de ser integradas en una plataforma para que actúe como sensor quiral. En concreto, se busca generar resonancias debido a la interacción de la luz circularmente polarizada con los sistemas quirales (observando cómo tanto la geometría de la nanoestructura como el material del dispositivo influyen en la eficiencia del sensor y su respuesta quiral), permitiendo

mayor sensibilidad y selectividad en la detección de parámetros quirales de una muestra biológica. Estas muestras son materiales que contienen moléculas con quiralidad, cuya estructura en el espacio distingue a sus enantiómeros (las dos configuraciones de una molécula quiral). Una mezcla racémica, que contiene cantidades iguales de ambos enantiómeros, puede tener propiedades biológicas o farmacológicas distintas a las de un solo enantiómero, lo que hace crucial su detección para garantizar la eficacia y seguridad en aplicaciones biomédicas y farmacéuticas.

Para ello, el proyecto se centrará en el diseño, simulación y análisis de un biosensor quiral óptico sintonizable, con el fin de diferenciar enantiómeros, lo cual es importante en la biomedicina, bioquímica y ciencias de la vida, donde las propiedades quirales de las moléculas determinan su funcionalidad o toxicidad.

Se estudiarán a fondo los fenómenos de la óptica electromagnética (y su aplicación a nanoescala), además de modelar y analizar con precisión la interacción de la luz con sistemas quirales complejos (teniendo en cuenta los parámetros que definen la respuesta quiral de un sistema), mediante técnicas de simulación computacional avanzada basadas en métodos de elementos finitos.

La motivación del proyecto viene de la creciente demanda de tecnologías de detección en el ámbito médico, donde los biosensores óptico quirales pueden revolucionar la investigación porque permiten identificar y analizar moléculas quirales con alta sensibilidad y especificidad (facilitando el diagnóstico y desarrollo de tratamientos personalizados), siguiendo adelante con las tendencias actuales de la nanofotónica y sus aplicaciones.

### 1.3. Estructura de la memoria

Este trabajo se ha estructurado de la siguiente forma: las primeras secciones están dedicadas a introducir las bases teóricas más relevantes. El capítulo 2 introduce los fundamentos de óptica y electromagnetismo, incluyendo las ecuaciones de Maxwell en el vacío, el concepto de luz como onda electromagnética y su polarización. En el capítulo 3, se aborda la interacción luz-materia, junto a los diferentes fenómenos de interacción.

Después, el capítulo 4 se centra en la quiralidad, la sección más relevante en este trabajo. Se explora su concepto y se presenta el formalismo usado en el estudio (formalismo de Tang y Cohen).

A continuación, en el capítulo 5, se detalla el método de resolución numérico utilizado: el método FDTD.

El capítulo 6 muestra y analiza los resultados más significativos obtenidos mediante el desarrollo del trabajo. Finalmente, en el capítulo 7 se expone el trabajo futuro.

# Capítulo 2

## Óptica y electromagnetismo

### 2.1. Ecuaciones de Maxwell en el vacío

En el siglo XIX, el físico escocés James Clerk Maxwell logró unificar los fenómenos eléctricos y magnéticos en tan solo cuatro ecuaciones. Antes de Maxwell, Coulomb describió la fuerza entre cargas eléctricas, Gauss formuló leyes sobre los campos eléctricos y magnéticos, Ampère descubrió la relación entre la corriente eléctrica y magnética, y Faraday descubrió la inducción electromagnética. Pero todos estos descubrimientos estaban por separado y no juntos, descritos en una teoría unificada. Aquí es cuando Maxwell en 1865 consigue juntar estos conocimientos en cuatro ecuaciones que describen la unificación del campo eléctrico y magnético [8–10].

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (2.1)$$

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

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

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t} \quad (2.4)$$

Donde  $\vec{E}$  es el campo eléctrico;  $\vec{B}$ , la inducción magnética;  $\rho$ , la densidad de carga eléctrica;  $\varepsilon_0$ , la permitividad eléctrica en el vacío;  $\mu_0$ , la permeabilidad magnética y  $\vec{J}$ , la densidad de corriente eléctrica.

La densidad de corriente eléctrica  $\vec{J}$ , mide el flujo de cargas por unidad de tiempo y superficie. Se conoce como la ley de Ampère [11].

$$\vec{J} = \rho \vec{v} \quad (2.5)$$

La Ec. 2.1 es la llamada Ley de Gauss Eléctrica. Indica que las cargas eléctricas generan un campo eléctrico. Las cargas positivas actúan como fuentes de campo, y las negativas como sumideros.

En cambio, la Ec. 2.2 se corresponde con la Ley de Gauss Magnética. Explica que las líneas del campo magnético siempre forman lazos cerrados y que no existen monopolos magnéticos en la naturaleza (es decir, la explicación de que al romper un imán se obtienen dos imanes más pequeños, y no dos medios-imanes). Aunque no existan “cargas magnéticas” en la naturaleza, se están investigando y se han logrado crear monopolos sintéticos en el laboratorio [12].

Por un lado, se sabe que un campo magnético cambiante genera un campo eléctrico. Esto lo indica la Ley de Faraday, Ec. 2.3.

Por otro lado, la Ley de Ampère-Maxwell, Ec. 2.4, representa lo contrario. Dicho en otras palabras, que un campo eléctrico cambiante, genera un campo magnético.

Sin embargo, hay que introducir otra relación para poder explicar la electrodinámica clásica. Esta es la conocida fuerza de Lorentz:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.6)$$

Es la fuerza que un campo magnético  $\vec{B}$  genera sobre una carga  $q$  que se encuentra bajo la acción de un campo eléctrico  $\vec{E}$ , y viaja con una velocidad  $\vec{v}$ .

Mediante esta ecuación, se puede concluir que cuando la velocidad y el campo  $\vec{B}$  son perpendiculares, la fuerza es máxima. En cambio, cuando ambos elementos son paralelos, la fuerza es nula. También se puede observar que esta fuerza será perpendicular al plano formado por  $\vec{v}$  y  $\vec{B}$ ; y cambiará de sentido si la carga cambia de signo. Finalmente, comentar que si la carga está en reposo; es decir, su velocidad es cero, el campo  $\vec{B}$  no ejerce ninguna fuerza sobre ella.

## 2.2. Luz como onda electromagnética

La luz es una forma de radiación electromagnética y se propaga a una cierta velocidad, dependiendo del medio por el que se viaja, siendo máxima en el vacío. La luz visible es solo una pequeña parte del espectro electromagnético, que también incluye a las ondas de radio, microondas, infrarrojo, ultravioleta, rayos X y rayos gamma. Lo que percibimos como luz es una parte del espectro que puede detectar el ojo humano, aproximadamente entre longitudes de onda de 400 y 700 nm.

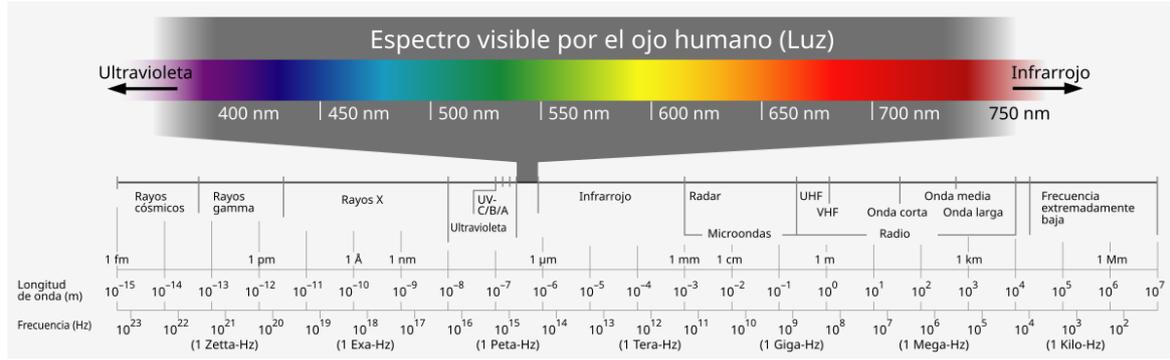


Figura 2.1: Imagen del espectro electromagnético, destacando la parte del espectro visible por el ojo humano, junto a su longitud de onda correspondiente (al igual que la frecuencia). Imagen extraída de [13].

La luz tiene una naturaleza transversal. Esto significa que las oscilaciones del campo magnético y eléctrico son perpendiculares entre sí y a la dirección de propagación de la onda.

Si se tiene una fuente que emite ondas electromagnéticas en el plano  $XY$  y se propagan en la dirección  $Z$ , y sus rayos para estas ondas son paralelos, se introduce el concepto de **onda plana**. Al juntar los puntos de igual fase en todas las ondas se obtienen planos paralelos; se dice que los frentes de onda son planos paralelos. En cambio, si se tiene una fuente puntual, los frentes de onda son esferas; por lo que se obtiene una **onda esférica**. Cuando la onda se aleja de la fuente, su curvatura va disminuyendo, hasta el punto que la fuente se considera muy lejana y los frentes de onda son paralelos, obteniendo así la aproximación de onda plana comentada anteriormente. Esta aproximación es de interés para incidir sobre nanoestructuras (su tamaño es mucho más pequeño que la distancia a la fuente) [14].

La onda plana descrita tiene la siguiente forma:

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = \tilde{E}(z) \quad (2.7)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \tilde{B}(z) \quad (2.8)$$

Si se toman las leyes de Maxwell, la de Amperé y la de Faraday, se obtiene los siguiente:

$$-\frac{\partial \tilde{E}_y}{\partial z} = i\omega \tilde{B}_x \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial z} = i\omega \tilde{B}_y \quad (2.10)$$

$$0 = \tilde{B}_z \quad (2.11)$$

$$-\frac{\partial \tilde{B}_y}{\partial z} = i\omega \epsilon_0 \mu_0 \tilde{E}_x \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial \tilde{B}_x}{\partial z} = -i\omega\epsilon_0\mu_0\tilde{E}_y \quad (2.13)$$

$$0 = \tilde{E}_z \quad (2.14)$$

A continuación se combinan las ecuaciones 2.9 con 2.13 y la 2.10 con la 2.12, utilizando la transformada de Fourier ( $\frac{\partial}{\partial t} = -i\omega$ ):

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}_x}{\partial z^2} = -\frac{\omega^2}{c^2}\tilde{E}_x \quad (2.15)$$

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

Se escribe sólo para la componente  $E_x$  porque para  $E_y$ ,  $B_x$  y  $B_y$  es equivalente. Las soluciones de la Ec. 2.15 son de la forma  $\tilde{E} = \tilde{A} \cdot e^{\pm ikz}$ . Donde  $k = \frac{\omega}{c}$  es el número de onda y el signo (positivo o negativo) indica el sentido de propagación de la onda.

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = e^{\pm ikz} \begin{pmatrix} \tilde{E}_x \\ \tilde{E}_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = e^{\pm ikz} \begin{pmatrix} \tilde{B}_x \\ \tilde{B}_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Conociendo la relación entre las amplitudes del campo magnético y eléctrico ( $|\tilde{\mathbf{E}}| = c_0|\tilde{\mathbf{B}}|$ ), y volviendo a usar Ec. 2.9 y Ec. 2.10, se puede reescribir la Ec. 2.17 de la siguiente forma:

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c}e^{\pm ikz} \begin{pmatrix} -\tilde{E}_y \\ \tilde{E}_x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Se define que  $E_0 = E_x$  y  $a = \frac{E_y}{E_x}$ .

Finalmente se obtiene la expresión de la onda plana:

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = E_0e^{\pm ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ ae^{i\varphi} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \frac{E_0}{c_0}e^{\pm ikz} \begin{pmatrix} -ae^{i\varphi} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Recordando que  $E_0, a \geq 0$  y  $\varphi \in [0, 2\pi]$ . En la forma más general, se escoge que una de las componentes tenga desfase 0 (de forma que la otra tiene el desfase “total”). Cuando estos tres parámetros están bien definidos, se dice que la luz está **polarizada**.

## 2.3. Polarización de la luz

La luz, como radiación electromagnética, se origina por la emisión de ondas a partir de los átomos en una fuente luminosa, donde las transiciones electrónicas generan oscilaciones del campo eléctrico. Estas oscilaciones, asociadas a las vibraciones de las cargas dentro de los átomos, dan lugar a componentes del campo eléctrico con direcciones variables. Por lo tanto, la dirección en la que vibra el campo eléctrico, es la dirección de polarización de cada una de las ondas individuales [14].

Cuando se emite luz natural, la luz no tiene una polarización definida, es decir, tenemos un haz de luz no polarizado o **luz despolarizada**. Esto significa que su polarización cambia continuamente en todas las direcciones de vibración, de una forma muy rápida. En cambio, se dice que la luz está **linealmente polarizada** si el vector del campo eléctrico o magnético resultante oscila en una sola dirección fija.

Si bloqueamos las componentes de la luz u ondas del haz que no están alineadas en una dirección específica, es decir, aquellas que tienen los vectores del campo eléctrico oscilando en un solo plano y dirección, se puede obtener luz linealmente polarizada a partir de luz despolarizada.

Los llamados polarizadores lineales transmiten toda la luz donde el vector del campo eléctrico es paralelo al eje de transmisión y absorbe cuando el vector es perpendicular al eje de transmisión. Dicho en otras palabras, cuando la luz despolarizada atraviesa un polarizador lineal, solo pasa la componente del vector eléctrico paralela al eje de transmisión del material, por lo que se consigue luz linealmente polarizada en esa dirección.

Al colocar dos polarizadores lineales cruzados (con los ejes de transmisión colocados perpendicularmente entre sí), bloquean todos los componentes de la luz; por lo que al final se obtendrá ausencia de luz.

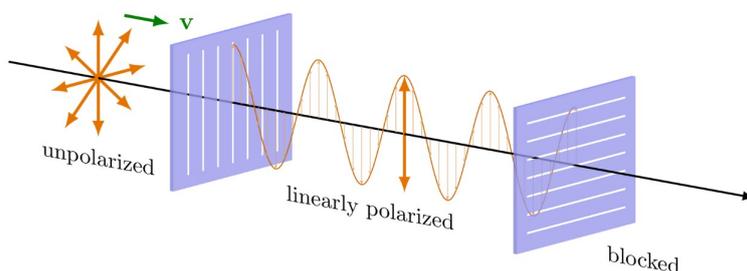


Figura 2.2: Esquema de la luz despolarizada atravesando dos polarizadores. Al cruzar el primer polarizador, la luz se polariza linealmente y al cruzar el segundo (como su eje de transmisión es perpendicular) desaparece su única componente. Imagen extraída de [15].

Además de la luz linealmente polarizada, existe la **luz elípticamente polarizada**, donde el vector del campo eléctrico describe una elipse en el plano perpendicular a la dirección de propagación.

Cuando se descompone el campo eléctrico en dos componentes perpendiculares; por ejemplo, dirección X y dirección Y, pueden tener amplitudes diferentes (cuando una componente oscila con mayor intensidad) incluso una diferencia de fase. Cuando estas dos condiciones ocurren a la vez, la suma vectorial de las oscilaciones genera un movimiento elíptico del campo eléctrico en el plano transversal.

La **luz circularmente polarizada** es un caso especial de la polarización elíptica, donde el vector del campo eléctrico gira describiendo un círculo en el plano perpendicular a la dirección de propagación.

A diferencia de la luz elíptica, la circularmente polarizada se produce cuando las dos componentes perpendiculares del campo eléctrico, descritas anteriormente, tienen la misma amplitud y una diferencia de fase constante de  $\pi/2$  radianes.

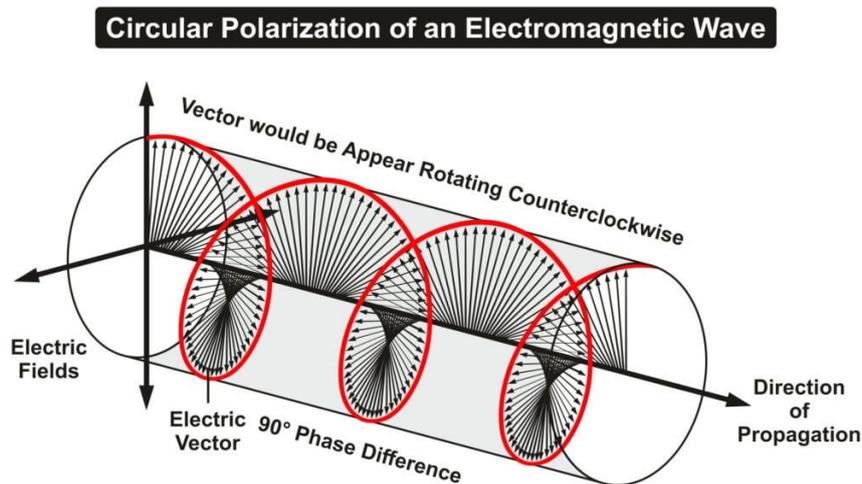


Figura 2.3: Representación de la luz circularmente polarizada. Se observan los vectores del campo eléctrico, que con la evolución temporal forman un círculo en el plano perpendicular a la dirección de propagación. Imagen extraída de [16].

La forma más común de obtener luz circularmente polarizada es usando un componente llamado lámina retardadora de cuarto de onda (lámina retardadora  $\lambda/4$ ). Se parte de luz linealmente polarizada con sus dos componentes iguales en las direcciones perpendiculares. Al atravesar una lámina  $\lambda/4$  se introduce un desfase de  $\pi/2$  entre las dos componentes, por lo que el vector del campo eléctrico ya no oscila en una línea recta, sino que gira formando un círculo.

Existen dos variantes de polarización circular o elíptica, dependiendo del sentido de rotación del campo eléctrico. Cuando el campo eléctrico rota en sentido horario, es dextrógira (gira a la derecha). Pero si el campo eléctrico rota en sentido antihorario, es levógira (gira a la izquierda). La diferencia entre ambos sentidos viene dada por qué componente del campo eléctrico está adelantada en fase.

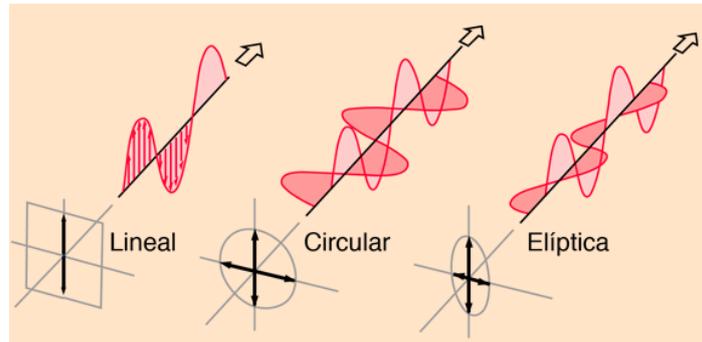


Figura 2.4: Representación de los tipos de polarización de las ondas transversales, lineal, circular y elíptica. Imagen extraída de [17].



# Capítulo 3

## Luz-materia

Dado que la nanofotónica estudia la interacción de la luz con la materia, es importante conocer en qué consiste la luz (2, pero también la materia. Para ello, este capítulo se centra en la interacción luz-materia, sobre todo en las nanopartículas.

### 3.1. Materia

La materia es todo lo que tiene masa y ocupa un volumen, constituyendo los componentes fundamentales del universo físico. La materia puede clasificarse según sus propiedades, como dieléctricos o metales. La gran diferencia entre ambos, da lugar con los electrones; en la manera que están en su estructura. Por un lado, en los dieléctricos, los electrones están fuertemente ligados a los átomos y no se mueven. Esto significa que no se conduce la electricidad en este tipo de materiales. En cambio, en los metales, como los electrones están libres y pueden moverse fácilmente, hay conducción eléctrica.

### 3.2. Ecuaciones de Maxwell en medios materiales

Las ecuaciones de Maxwell macroscópicas introducen nuevos parámetros y campos para explicar el comportamiento de las cargas dentro de un material. Se incluyen los efectos de la polarización eléctrica ( $\mathbf{P}$ ) y la magnetización del material ( $\mathbf{M}$ ), lo que introduce los campos de desplazamiento eléctrico ( $\mathbf{D}$ ) y magnético ( $\mathbf{H}$ ). Referencias tomadas de [18]. Las siguientes ecuaciones describen la interacción entre los campos electromagnéticos y las propiedades del medio, que se explicarán más adelante.

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_f \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (3.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J}_f + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (3.4)$$

En el trabajo propuesto no hay cargas libres en el vacío y los materiales son neutros por lo que  $\rho_f = 0$ . También hay que tener en cuenta que la respuesta magnética de los materiales es cero ( $\mathbf{M} = 0$ ), así que  $\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}$ . Por último, saber que los campos son complejos, y tienen un desfase entre los campos eléctricos y magnéticos que no se puede olvidar. Finalmente, las Ecuaciones de Maxwell en medios materiales son las siguientes:

$$\nabla \cdot \widetilde{\mathbf{E}}_0 = 0 \quad (3.5)$$

$$\nabla \cdot \widetilde{\mathbf{B}}_0 = 0 \quad (3.6)$$

$$\nabla \times \widetilde{\mathbf{E}}_0 = -i\omega \widetilde{\mathbf{B}}_0 \quad (3.7)$$

$$\nabla \times \widetilde{\mathbf{B}}_0 = i\omega \varepsilon_0 \mu_0 \widetilde{\mathbf{E}}_0 \quad (3.8)$$

### 3.3. Propiedades de la materia

Cuando la materia interacciona con la luz, ésta responde de diferentes formas, dependiendo de sus propiedades.

La **susceptibilidad** ( $\chi$ ) es la respuesta de un material al aplicar un campo eléctrico o magnético externo. Tiene forma de tensores (matrices) y dependiendo de su forma se pueden dividir los compuestos **isótropos** de los **anisótropos**. En los materiales isótropos la susceptibilidad es un número escalar, pero en los anisótropos todos los valores de la matriz son diferentes (ya que sus propiedades cambian en función de la dirección). En los metales es un valor negativo y en los dieléctricos positivo.

En nanofotónica la mayoría de medios son lineales, isótropos y homogéneos. Se cumple:

$$\widetilde{\mathbf{P}} = \widetilde{\chi} \varepsilon_0 \widetilde{\mathbf{E}} \quad (3.9)$$

Donde  $\varepsilon_0$  es la permitividad eléctrica del vacío.

Una vez se sabe la respuesta del material al campo aplicado, se tiene directamente relacionada la capacidad del material de absorber la energía aplicada. Para ello se introduce la propiedad llamada **permitividad eléctrica** ( $\varepsilon$ ). Se utiliza la permitividad relativa, que es el cociente entre la permitividad del material y la permitividad en el vacío.

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \quad (3.10)$$

También se expresa de esta forma la **permeabilidad magnética** ( $\mu$ ), pero en este caso, como los materiales de interés no son magnéticos, la permeabilidad magnética relativa será muy próxima a uno ( $\mu_r \approx 1$ ).

La permitividad puede ser un número complejo, de la forma  $\widetilde{\varepsilon} = \varepsilon' + i\varepsilon''$ ; ya que su parte real representa la capacidad de almacenamiento de energía eléctrica del material,

y la parte imaginaria la absorción (es decir, las pérdidas de energía).

Comentar que la permitividad afecta a la velocidad de la luz, y por lo tanto a su longitud de onda en el material.

Por último se tiene la **conductividad eléctrica**( $\sigma$ ); que mide qué tan bien un material conduce la electricidad. Esta propiedad aparece en la Ley de Ohm:

$$\tilde{\mathbf{J}} = \sigma \tilde{\mathbf{E}} \quad (3.11)$$

Un valor importante a tener en cuenta en este proyecto es el **índice de refracción** ( $\mathbf{n}$ ). Mide cuanto se reduce la velocidad de la luz al pasar de un medio a otro.

$$n = \frac{c_0}{c} \quad (3.12)$$

Se suele expresar como un número real para los dieléctricos y complejo para los metales, de la forma  $\tilde{n} = n + ik$ . La parte imaginaria  $k$  describe la absorción del material, llamado coeficiente de extinción. Si este valor es muy alto, significa que el material es reflectante, y si es igual a 0, la luz se desvía y por lo tanto no se absorbe.

Gracias a los índices de refracción, se puede medir la refracción de la luz ocurrida entre dos materiales con la Ley de Snell:

$$n_1 \cdot \sin\theta_1 = n_2 \cdot \sin\theta_2 \quad (3.13)$$

Además se puede relacionar el índice de refracción con la permitividad eléctrica y permeabilidad magnética (ambas relativas):

$$\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_r \mu_r} \quad (3.14)$$

## 3.4. Modelos de interacción

En este trabajo se consideran materiales no magnéticos, por lo tanto  $\mu = 1$  y la respuesta estará determinada por la permitividad eléctrica. A continuación se muestran los diferentes modelos de interacción que se tendrán en cuenta (se ha consultado el trabajo [19]):

### 3.4.1. Modelo de Lorentz

Este modelo describe la respuesta de un material dieléctrico; es decir, considerando que los electrones están ligados a los núcleos atómicos mediante una fuerza restauradora, (como un oscilador armónico). Bajo un campo eléctrico externo, ( $\vec{E}$ ) los electrones se mueven y generan dipolos eléctricos que contribuyen a la polarización del medio.

La ecuación del movimiento para un electrón, en este caso, ligado, bajo un campo eléctrico oscilante ( $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$ ), es la siguiente:

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{x}}{dt} + m\omega_0^2 \vec{x} = -e\vec{E} \quad (3.15)$$

donde  $m$  es la masa del electrón,  $\vec{x}$  es su desplazamiento,  $e$  es su carga,  $\gamma$  es el coeficiente de amortiguamiento,  $\omega_0$  es la frecuencia de resonancia natural y  $\omega$  es la frecuencia del campo.

Sustituyendo la expresión del campo eléctrico oscilante planteada anteriormente, se tendrá una solución de la forma  $\vec{x} = \vec{x}_0 e^{-i\omega t}$ , (donde  $\vec{x}_0$  es la amplitud). Al derivar:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = -i\omega\vec{x}_0 e^{-i\omega t}, \quad \frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = (-i\omega)^2\vec{x}_0 e^{-i\omega t} = -\omega^2\vec{x}_0 e^{-i\omega t} \quad (3.16)$$

Y se sustituye en la ecuación del movimiento (Ec. 3.15), se cancela  $e^{-i\omega t}$  en ambos lados y se factoriza  $\vec{x}_0$ :

$$\vec{x}_0(-\omega^2 - i\gamma\omega + \omega_0^2) = -\frac{e}{m}\vec{E}_0 \quad (3.17)$$

La polarización  $\vec{P}$  se calcula como  $\vec{P} = Ne\vec{x}$ , donde  $N$  es la densidad de electrones. Entonces:

$$\begin{aligned} \vec{P} &= Ne(\vec{x}_0 e^{-i\omega t}) = Ne \left( \frac{\frac{e}{m}\vec{E}_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} e^{-i\omega t} \right) = \\ &= Ne \frac{\frac{e}{m}\vec{E}_0 e^{-i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} = N \frac{e^2}{m} \frac{\vec{E}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \end{aligned} \quad (3.18)$$

La susceptibilidad eléctrica  $\chi$  se define como  $\vec{P} = \varepsilon_0\chi\vec{E}$ , por lo que:

$$\chi = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (3.19)$$

Donde  $\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m\varepsilon_0}}$  es la frecuencia de plasma.

Finalmente, la permitividad relativa es  $\varepsilon_r(\omega) = 1 + \chi$ :

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (3.20)$$

### 3.4.2. Modelo de Drude

El modelo de Drude describe la respuesta de los metales; donde se consideran los electrones libres (sin fuerza restauradora ( $\omega_0 = 0$ )). La ecuación de movimiento para un electrón bajo un campo eléctrico  $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$  es:

$$m \frac{d^2\vec{x}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{x}}{dt} = -e\vec{E} \quad (3.21)$$

Se sigue el mismo procedimiento que para el modelo de Lorentz; dicho en otras palabras, se asume  $\vec{x} = \vec{x}_0 e^{-i\omega t}$ , se deriva y se sustituye en la ecuación del movimiento (Ec. 3.21). Obteniendo la siguiente expresión:

$$\vec{x}_0 = \frac{\frac{e}{m}\vec{E}_0}{-\omega^2 - i\gamma\omega} = -\frac{\frac{e}{m}\vec{E}_0}{\omega^2 + i\gamma\omega} \quad (3.22)$$

La polarización es:

$$\vec{P} = Ne\vec{x} = Ne \left( -\frac{\frac{e}{m}\vec{E}_0 e^{-i\omega t}}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right) = N \frac{e^2}{m} \frac{\vec{E}}{-\omega^2 - i\gamma\omega} \quad (3.23)$$

Y la susceptibilidad:

$$\chi_e = \frac{\omega_p^2}{-\omega^2 - i\gamma\omega} \quad (3.24)$$

Finalmente, la permitividad relativa es la siguiente:

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (3.25)$$

### 3.5. Respuesta electromagnética de nanoestructuras

Cuando una onda de luz incide sobre una estructura más pequeña o comparada con la longitud de onda de la luz incidente, el material puede dispersar la radiación o absorberla. En el caso de las nanoestructuras, al interactuar con la luz, aparecen densidades de carga y corrientes que pueden llegar a dar lugar a la emisión de radiación o convertir la energía en otras formas (como calor, debido al efecto Joule).

La dispersión o **scattering** ocurre cuando el material remite la luz modificando su dirección e intensidad. Por ejemplo, la reflexión y difracción son tipos de scattering. La **absorción** es cuando parte de la energía de la luz se queda dentro del material. Si se suma la pérdida total de energía de ambos procesos se obtiene lo que se llama la **extinción**. A continuación se muestra una figura representativa de la interacción de la luz con una partícula (se ha consultado [20]):

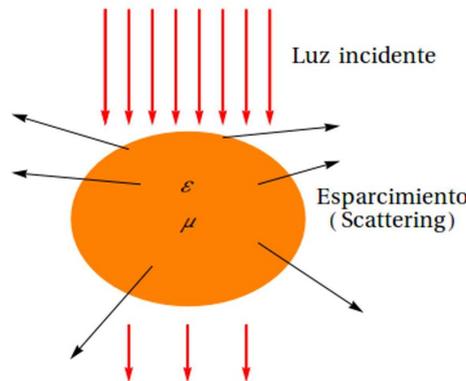


Figura 3.1: Representación de la luz incidente en una partícula, destacando el proceso de scattering. Imagen extraída de [21].

Estos procesos se estudian de diferentes maneras, pero en este trabajo los más relevantes los más utilizados en el área de la nanofotónica: el campo lejano y el campo cercano.

### 3.5.1. Respuesta de campo lejano

Se hacen las mediciones a una distancia lejana, tal y como dice su nombre. Son distancias significativamente mayores a las dimensiones de la partícula. Se considera “lejano”, cuando las ondas electromagnéticas emitidas por una partícula se aproximan a un comportamiento plano.

El criterio para el campo lejano [22] se expresa como:

$$r \gg \frac{2a^2}{\lambda},$$

donde  $r$  es la distancia de observación,  $a$  es el radio de la partícula y  $\lambda$  es la longitud de onda de la luz.

Mediante el campo lejano se realiza el análisis de la radiación electromagnética emitida por nanoestructuras utilizando las secciones eficaces para cuantificar la interacción luz-materia. Estas secciones eficaces son la de dispersión, absorción y extinción, y se obtienen integrando el vector de Poynting ( $\vec{S} = \frac{1}{\mu_0}(\vec{E} \times \vec{B})$ ) sobre una superficie que encierra la nanoestructura; dicho en otras palabras, se integra el flujo de energía electromagnética sobre la superficie a trabajar.

$$\sigma_{\text{scat}} = \frac{\int_A \mathbf{S}_{\text{scat}} \cdot d\mathbf{A}}{I_{\text{inc}}} \quad (3.26)$$

$$\sigma_{\text{abs}} = -\frac{\int_A \mathbf{S}_{\text{total}} \cdot d\mathbf{A}}{I_{\text{inc}}} \quad (3.27)$$

Como se ha comentado anteriormente, la extinción es la suma de la contribución del scattering y la absorción, por lo que su sección eficaz es también la suma:  $\sigma_{\text{ext}} = \sigma_{\text{scat}} + \sigma_{\text{abs}}$

Estas magnitudes, expresadas en unidades de área, se normalizan dividiéndolas por el área geométrica de la esfera ( $\pi R^2$ ) para obtener las eficiencias ( $Q_{\text{scat}}, Q_{\text{abs}}, Q_{\text{ext}}$ ).

A continuación se muestra un ejemplo del espectro de la sección eficaz de extinción para una esfera de silicio de 436nm de radio, obtenido mediante el campo lejano.

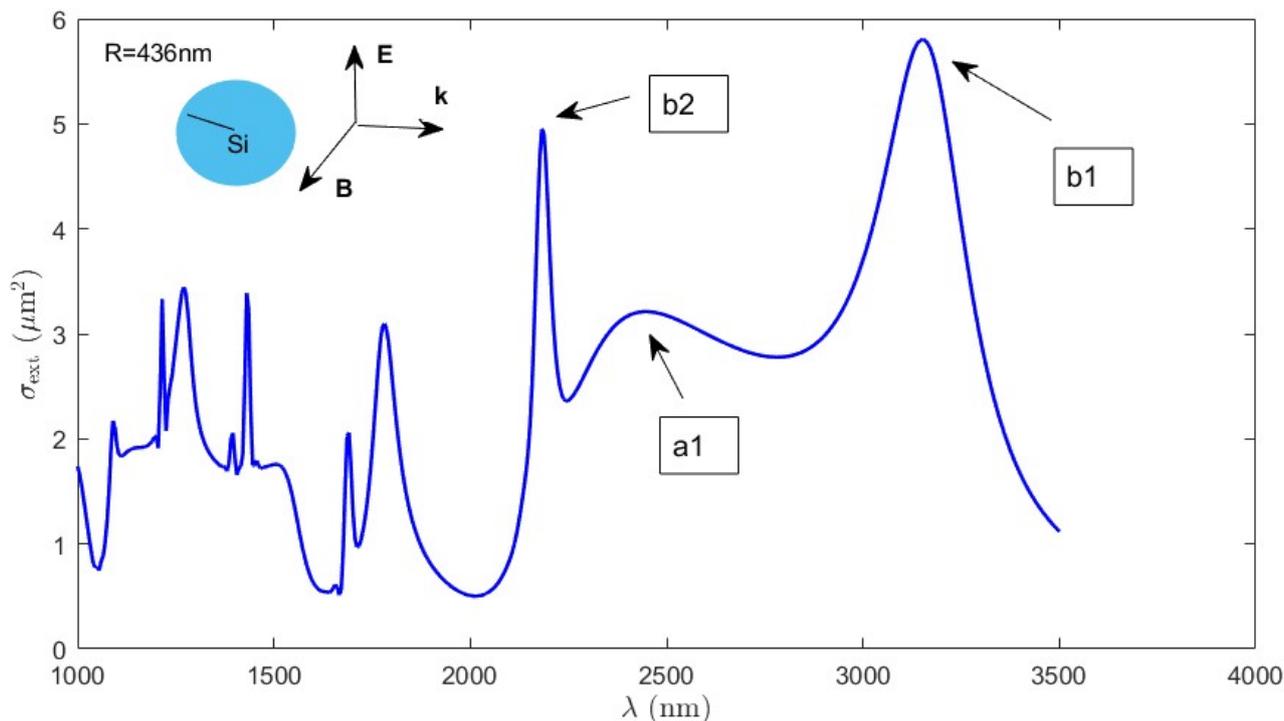


Figura 3.2: Representación de la sección eficaz de extinción para una esfera de silicio de radio de 436nm. Se etiquetan los de resonancia; b1 en 3132,13nm, a1 en 2381,49nm, y b2 en 2159,42nm. Imagen de elaboración propia.

En la imagen se muestran diferentes picos correspondientes a los modos de resonancia responsables de la extinción [23]. Entre ellos se destacan los más importantes.

El dipolo magnético (b1) ocurre cuando las corrientes o momentos magnéticos de un sistema oscilan generando un campo magnético con un patrón dipolar (como un imán con polo norte y polo sur). Este tipo de resonancias surgen cuando las dimensiones de la partícula son comparables a la longitud de onda incidente, así el campo magnético interno se hace mayor.

El dipolo eléctrico (a1) toma lugar cuando se separan las cargas positivas y negativas dentro de un material. La luz incidente desplaza los electrones creando una polarización inducida.

El cuadrupolo magnético (b2), siendo un orden magnético superior, ocurre cuando hay cuatro polos efectivos; dicho en otras palabras, dos pares de norte-sur.

Esta notación de  $a_n$  (multipolos eléctricos) y  $b_n$  (multipolos magnéticos) viene dada por la **Teoría de Mie**.

La teoría de Mie describe cómo las ondas electromagnéticas interactúan con partículas esféricas de tamaño comparable o mayor a la longitud de onda, generando patrones

de dispersión que incluyen resonancias específicas, como en la Figura 3.2.

La solución de la ecuación de onda se vuelve compleja cuando la partícula tiene un tamaño del orden de la longitud de onda de la radiación incidente, y esta solución fue encontrada por Gustav Mie en el año 1908. La conocida dispersión de Rayleigh es un caso de la teoría de Mie, pero en particular para partículas pequeñas.

Los **modos normales**, de esta teoría son las resonancias que se muestran en la Figura 3.2, y son cuantificados por los **coeficientes de Mie**,  $a_n$  (multipolos eléctricos) y  $b_n$  (multipolos magnéticos). En el Apéndice A, se muestra un desarrollo resumido de la Teoría de Mie.

Con este método de la respuesta de campo lejano se estudia cómo las propiedades geométricas y los materiales de las nanoestructuras ayudan a identificar resonancias. En este trabajo se utilizará este método para estudiar la respuesta quiral.

### 3.5.2. Respuesta de campo cercano

En comparación con el campo lejano, en el campo cercano se hace el análisis en la escala de la nanoestructura o menores que su longitud de onda. Para ello se emplean mapas con el fin de visualizar la concentración del campo en un punto (mediante simulaciones FDTD, que es la utilizada en este trabajo).

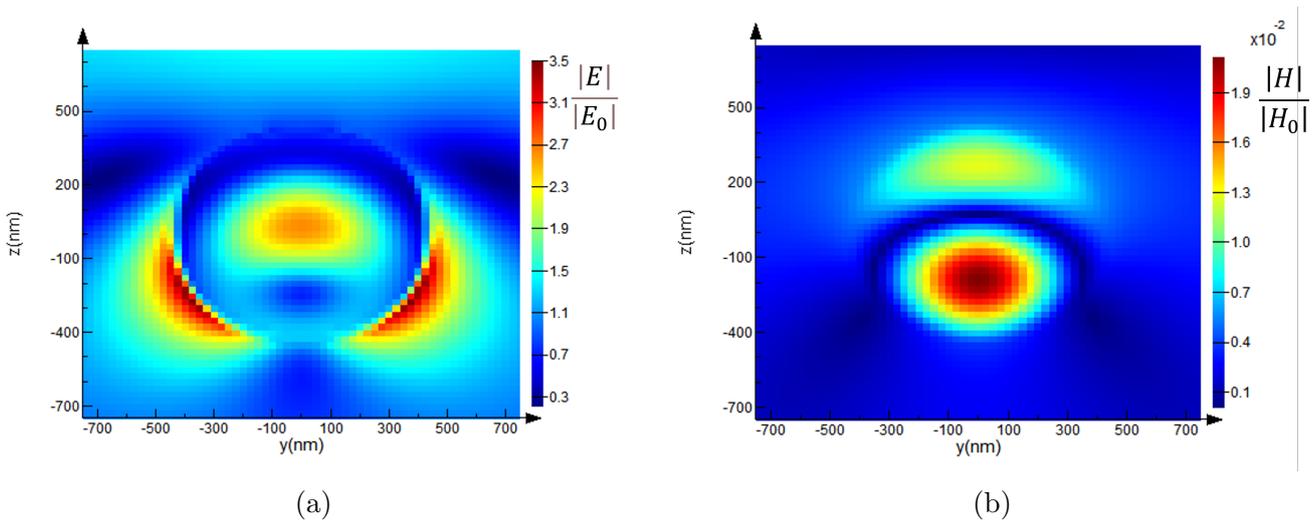


Figura 3.3: (a) Representación del campo eléctrico de una esfera de silicio de 436nm, para una longitud de onda de 2381,49nm, correspondiente al modo dipolar eléctrico. (b) Representación del campo magnético de una esfera de silicio de 436nm, para una longitud de onda de 2381,49nm, correspondiente al modo dipolar eléctrico. Imágenes de elaboración propia.

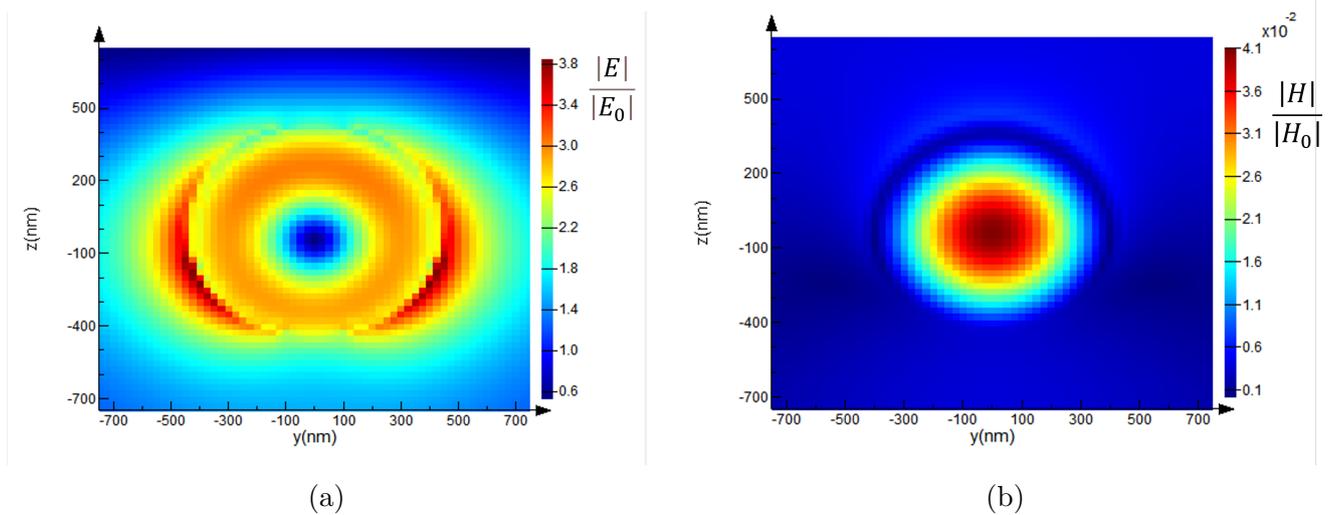


Figura 3.4: (a) Representación del campo eléctrico de una esfera de silicio de 436nm, para una longitud de onda de 3132,13nm, correspondiente al modo dipolar magnético. (b) Representación del campo magnético de una esfera de silicio de 436nm, para una longitud de onda de 3132,13nm, correspondiente al modo dipolar magnético. Imágenes de elaboración propia.

Al complementar el campo cercano con el campo lejano, se obtiene un análisis más completo permitiendo optimizar diseños de nanoestructuras para efectos quirales.



# Capítulo 4

## Quiralidad

La quiralidad a nanoescala se ha convertido en un área de interés en la ciencia y la ingeniería de materiales, con implicaciones en diferentes campos como la fotónica, computación cuántica y biomedicina.

Es un fenómeno que se observa en todas las escalas desde las moléculas más pequeñas hasta las estructuras cósmicas más grandes.

### 4.1. Concepto de quiralidad

La quiralidad es una propiedad geométrica de que un objeto no se puede superponer con su imagen especular, o con su imagen en un espejo. Este concepto proviene del griego "kheir" (mano). Las manos son el ejemplo clásico de la quiralidad, ya que la mano derecha no se puede superponer con la mano izquierda, ni mediante la traslación ni la rotación.

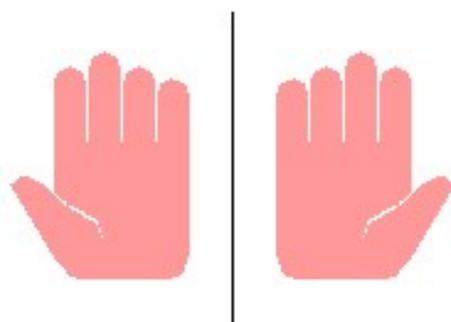


Figura 4.1: Representación de las manos humanas, siendo un gran ejemplo de quiralidad, ya que no se pueden superponer una encima de la otra. Imagen extraída de [24].

Los **enantiómeros** son moléculas quirales que son la imagen especular la una de la otra. Son moléculas con la misma composición química pero diferente configuración espacial. Para diferenciarlos, se utiliza la letra R (diestro) o S (zurdo).

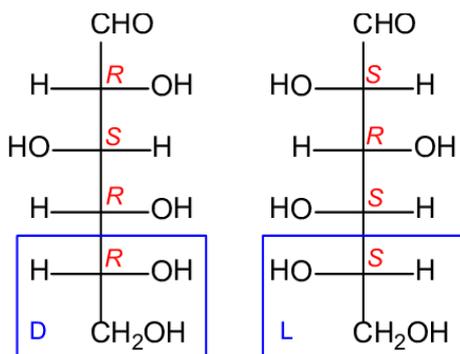


Figura 4.2: Representación de una molécula quiral. Se muestran los dos enantiómeros de la glucosa. Imagen extraída de [25].

Aunque los dos enantiómeros tengan la misma composición química y algunas propiedades en común (como la masa molecular, temperatura de fusión, etc.), tienen algunos comportamientos diferentes. Al interactuar con la luz, rotan el plano de la luz polarizada (**actividad óptica**). Es decir, cuando la luz linealmente polarizada atraviesa un material quiral, las componentes circularmente polarizadas que la componen viajan a diferentes velocidades. Esto produce una diferencia de fase entre ellas.

El **dicroísmo circular**(CD), mide la diferencia en la absorción de luz circularmente polarizada derecha (RCP) y luz circularmente polarizada izquierda (LCP) por un material quiral. Se define de la siguiente forma:

$$CD = A_{LCP} - A_{RCP} \quad (4.1)$$

Donde  $A_{LCP}$  y  $A_{RCP}$  son las absorbancias correspondientes a la luz LCP y RCP. Comentar que es un efecto muy débil observado en las moléculas.

En el caso de las nanoestructuras, cuando no hay moléculas, el dicroísmo circular que se analiza es el de la extinción; es decir, el CD se define como la diferencia de extinciones de la luz levógira y dextrógira.

Además, la luz también es quiral. Este es el caso de la luz circularmente polarizada; ya que la luz levógira no es superponible con la luz dextrógira, que es su imagen especular. Se dice que la luz circularmente polarizada es quiral.

## 4.2. Formalismo de Tang-Cohen

El formalismo de Tang-Cohen modela la interacción de la luz circularmente polarizada con moléculas quirales (analiza la absorción de los enantiómeros (R y S) [26].

Se añade una contribución a los momentos dipolares eléctrico ( $\vec{p}$ ) y magnético ( $\vec{m}$ ) inducidos en la molécula para mejorar la aproximación de una molécula como dipolo puntual; ya que en esta aproximación la molécula responde de la misma forma a la

luz RCP y LCP. Por lo que para tener en cuenta el dicroísmo circular, se añaden estos dos conceptos:

$$\vec{p} = \tilde{\alpha}\vec{E} - iG\vec{B} \quad (4.2)$$

$$\vec{m} = \tilde{\chi}\vec{B} + iG\vec{E} \quad (4.3)$$

con  $\tilde{\alpha}$  y  $\tilde{\chi}$  siendo las polarizabilidades eléctrica y magnética de la molécula (de la aproximación de dipolo puntual).  $G$  es la polarizabilidad quiral, que es no nulo cuando la molécula es quiral.

La tasa de absorción se define de la siguiente manera:

$$A = \langle \vec{E} \cdot \dot{\vec{p}} + \vec{B} \cdot \dot{\vec{m}} \rangle = \frac{\omega}{2} \text{Im} \left[ \vec{E}^* \cdot \vec{p} + \vec{B}^* \cdot \vec{m} \right] \quad (4.4)$$

donde el superíndice \* muestra que es un conjugado complejo. Combinando con las Ec. 4.2 y Ec. 4.3:

$$A^\pm = \left( \alpha'' |\vec{E}|^2 + \chi'' |\vec{B}|^2 \right) \pm G'' \omega \text{Im} \left[ \vec{E}^* \cdot \vec{B} \right] = \left( \alpha'' |\vec{E}|^2 + \chi'' |\vec{B}|^2 \right) \mp \frac{2}{\varepsilon_0} G'' C \quad (4.5)$$

En este caso las comillas indican la parte imaginaria de las polarizabilidades,  $\omega$  la frecuencia angular de la luz, el superíndice de  $A$  representa la polarización circular derecha o izquierda y  $C$  es la densidad quiral. Tiene la siguiente forma:

$$C = \frac{\varepsilon_0}{2} \vec{E} \cdot (\nabla \times \vec{E}) + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B} \cdot (\nabla \times \vec{B}) = -\frac{\omega\varepsilon_0}{2} \text{Im} \left[ \vec{E}^* \cdot \vec{B} \right] \quad (4.6)$$

Como se puede observar en la expresión anterior, la densidad quiral depende sólo del campo electromagnético incidente.

Volviendo a la Ec. 4.5, se desprecia el término  $\chi'' |\vec{B}|^2$  porque en comparación con  $\alpha'' |\vec{E}|^2$  es una cantidad muy pequeña:

$$A^\pm = \alpha'' |\vec{E}|^2 \mp \frac{2}{\varepsilon_0} G'' C \quad (4.7)$$

En esta ecuación, se puede observar que el término  $G''$  no se ha despreciado (es una corrección de absorción del dipolo), y es un valor pequeño comparado con  $\alpha'' |\vec{E}|^2$ , lo que vuelve a destacar que el dicroísmo circular es un efecto muy pequeño.

La relación de absorción entre dos enantiómeros se relaciona mediante el factor de disimetría:

$$g = 2 \frac{A^+ - A^-}{A^+ + A^-} = - \left( \frac{G''}{\alpha''} \right) \left( \frac{8C}{\omega\varepsilon_0 |\vec{E}|^2} \right) \quad (4.8)$$

Tang y Cohen fueron capaces de expresar este factor como el producto de una parte que depende de las propiedades de la molécula, y otra que depende del campo magnético que la rodea.

### 4.2.1. Formalismo de Tang-Cohen para onda plana

Se va a utilizar la ecuación previamente vista de la onda plana; es decir, elípticamente polarizada, Ec. 2.19 y Ec. 2.20. A continuación se muestra la densidad quiral para una onda plana, mediante la Ec. 4.6:

$$C_{\text{elliptic}} = -\frac{\omega\varepsilon_0}{2} \text{Im} \left[ \vec{E}^* \cdot \vec{B} \right] = E_0^2 \frac{a\varepsilon_0\omega^2}{c} \sin\varphi = \frac{a}{1+a^2} \left| \vec{E} \right|^2 \frac{\omega\varepsilon_0}{c} \sin\varphi \quad (4.9)$$

El valor es máximo con la luz circularmente polarizada (LCP); es decir, cuando  $\alpha = 1$ ,  $\varphi = \pm\frac{\pi}{2}$ . Pero cuando es linealmente polarizada ( $\varphi = 0, \pi$ ), se obtiene que  $C = 0$ , no hay diferencia de absorción.

$$C_{\text{LCP}} = \pm \frac{\omega\varepsilon_0}{2c} \left| \vec{E} \right|^2 \quad (4.10)$$

Si sustituimos este valor máximo de la densidad en la Ec. 4.8 del factor de disimetría:

$$g_{\text{LCP}} = -\frac{4G''}{c\alpha''} \quad (4.11)$$

Es útil definir una cantidad normalizada:

$$\hat{g} = \frac{g}{g_{\text{LCP}}} = \frac{2cC}{\omega\varepsilon_0 \left| \vec{E} \right|^2} = c \frac{\text{Im} \left[ \vec{E}^* \cdot \vec{B} \right]}{\left| \vec{E} \right|^2} \quad (4.12)$$

## 4.3. Aplicaciones biológicas

La quiralidad tiene grandes implicaciones en el ámbito biológico y médico. Muchos bioreceptores del cuerpo humano son quirales es decir, son moléculas con la misma composición química pero configuraciones espaciales diferentes. Dependiendo del enantiómero pueden causar efectos biológicos o no.

Un ejemplo conocido es el medicamento llamado talidomida. A principios del año 1960 la talidomida se utilizaba en mezcla racémica; es decir como mezcla de los enantiómeros R y S, para tratar las náuseas durante el embarazo. Pero este fármaco reproducción malformaciones en los bebés recién nacidos y llegó a afectar a alrededor de 10000 niños. Con estudios se ha demostrado que solo el enantiómero R era activo pero el S era el que afectaba negativamente al feto (referencias tomadas de [24] y [20]).

Existen muchos otros fármacos quirales que se utilizan en el día a día para tratar enfermedades como el Parkinson o Alzheimer. Pero además se tiene como ejemplo el ibuprofeno. Este medicamento es una mezcla racémica de sus dos enantiómeros, pero solo el S es el que tiene actividad antiinflamatoria, mientras que el enantiómero R, es inactivo.

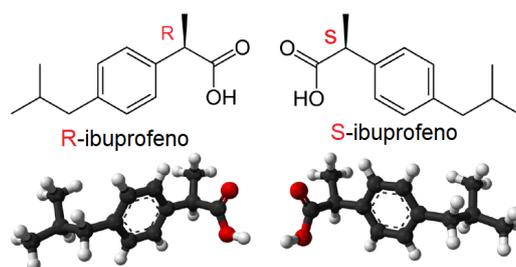


Figura 4.3: Imagen de la molécula ácido 2-(4-isobutilfenil)propiónico, más conocida como ibuprofeno. En la figura se muestran los dos enantiómeros, R y S. Imagen extraída de [27]

Por lo tanto, el diferenciar y separar enantiómeros es un aspecto clave en la biomedicina (resalta su importancia en el artículo [28]) y esto motiva a investigar tecnologías avanzadas como los biosensores ópticos quirales.

Para diseñar un biosensor hay que centrarse en nanoestructuras que tengan una respuesta quiral específica. Cuando la luz interacciona con las nanoestructuras, éstas generan resonancias ópticas que dependen de la polarización de la luz incidente y de la geometría y material de las nanoestructuras. Así que los biosensores se diseñan para detectar los parámetros quirales de las muestras biológicas.



# Capítulo 5

## Resolución numérica: FDTD

En el capítulo 3, se ha analizado la solución analítica de las ecuaciones de Maxwell que describe la interacción de la luz con partículas esféricas de tamaño comparable a la longitud de onda de la radiación incidente. Pero para casos más generales, especialmente en el ámbito de la nanofotónica, no existen soluciones exactas, por lo que es necesario pasar a métodos numéricos avanzados. Entre los más conocidos se encuentran “Finite Element Method” (FEM) y “Finite Difference Time-Domain Method” (FDTD). En este trabajo se va a utilizar el software comercial llamado “Lumerical FDTD”.

El método FDTD se basa en discretizar el espacio y tiempo de las ecuaciones de Maxwell en su forma diferencial, así se simula la propagación de ondas electromagnéticas en estructuras complejas y se utiliza la teoría de Mie como referencia teórica. Supongamos un caso en una dimensión donde la propagación es en la dirección  $z$ . Es decir, las ecuaciones de Maxwell son de la siguiente forma (se ha consultado [29]):

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (5.2)$$

Como se ha comentado anteriormente, en este método se discretizan las ecuaciones de Maxwell por lo que se reemplazan las derivadas parciales como incrementos finitos:

$$\frac{E_x^{n+1/2}(k) - E_x^{n-1/2}(k)}{\Delta t} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{H_y^n(k + \frac{1}{2}) - H_y^n(k - \frac{1}{2})}{\Delta z} \quad (5.3)$$

$$\frac{H_y^{n+1}(k + \frac{1}{2}) - H_y^n(k - \frac{1}{2})}{\Delta t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{E_x^{n+1/2}(k + 1) - E_x^{n-1/2}(k)}{\Delta z} \quad (5.4)$$

Estas dos ecuaciones reflejan una estructura escalonada de la malla de Yee, donde  $E$  y  $H$  se calculan en posiciones desplazadas espacialmente (definido por  $k$ ) y temporalmente (definido por  $n$ ). Una vez se tiene esta doble celda, se utiliza el algoritmo *leapfrog*, que usando una relación de recurrencia calcula los campos de forma iterativa. Si se añade un factor que relaciona la diferencia de amplitudes ( $\sqrt{\varepsilon_0/\mu_0}$ ):

$$E_x^{n+1/2}(k) = E_x^{n-1/2}(k) + \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0} \Delta z} \Delta t \left[ H_y^n \left( k - \frac{1}{2} \right) - H_y^n \left( k + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (5.5)$$

$$H_y^{n+1} \left( k + \frac{1}{2} \right) = H_y^n \left( k + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0} \Delta z} \Delta t \left[ E_x^{n-1/2}(k) - E_x^{n+1/2}(k+1) \right] \quad (5.6)$$

Se calculan los campos, y se forma el cubo de Yee, que ocurre cuando los campos eléctricos y magnéticos se entrelazan en puntos equidistantes en una estructura de cubo:

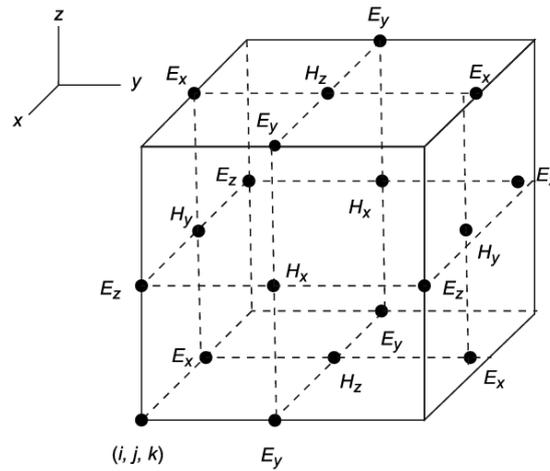


Figura 5.1: Imagen de la celda de Yee, donde las componentes del campo eléctrico se hallan en la mitad de las aristas y las componentes del campo magnético están en el centro de las caras. Imagen extraída de [30].

Si se intersectan varias de estas celdas, se obtiene la malla de Yee:

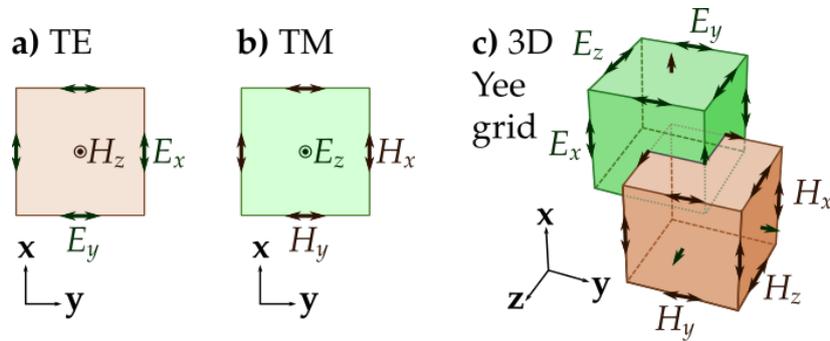


Figura 5.2: Imagen de la malla de Yee, donde las componentes del campo eléctrico y magnético intersectan en las caras y aristas. Imagen extraída de [31].

Para que el método funcione correctamente, y lleguemos a una simulación convergente, hay que darles importancia a las condiciones de simulación; por ejemplo, el

tiempo y espacio de la simulación, las características de la fuente, el mallado adecuado...

Un mallado adecuado es aquel que cumple la condición de Courant-Friedrichs-Lewy:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta z}{c} \quad (5.7)$$

Es decir, la propagación del campo no puede ser mayor que una celda espacial por cada celda temporal.

Por lo tanto, tener un mallado fino nos asegura unos resultados más fiables pero el tiempo de computación será mayor, al igual que la memoria usada.

Entre las ventajas del método FDTD, se encuentra que no es necesario cambiar las condiciones de contorno para simular diferentes medios que están en la misma región de simulación, lo que lo diferencia de otros métodos. Además, este algoritmo se destaca entre otros esquemas de diferencias finitas debido a que utiliza diferencias espacio-temporales centradas para aproximar las derivadas; logrando una precisión de segundo orden. También cabe destacar que el algoritmo leapfrog sólo tiene una pequeña dispersión, la cual es despreciable, comparada con la dispersión física de la estructura en estudio.

Sin embargo, también tiene limitaciones. Entre ellas, el aumento de la discretización de toda la región de simulación, puede volverse inviable en términos de memoria y tiempo de cálculo. También la región del espacio debe discretizarse adecuadamente, lo que puede implicar mayor tiempo computacional, especialmente con geometrías complejas, pudiendo requerir desde minutos hasta horas según la densidad de celdas.



# Capítulo 6

## Resultados y discusión

Este área de la nanofotónica es muy novedosa y reciente, por lo que encontrar resultados es una labor compleja. Hoy en día hay mucho interés y existe una gran cantidad de grupos de investigación que trabajan para obtener resultados coherentes.

Debido a la complejidad de las respuestas de estas estructuras dieléctricas, se recuerda el propósito de este trabajo, que es aprender a desarrollar algoritmos que sean capaces de facilitar instrucciones a un software comercial, que es capaz de resolver problemas electromagnéticos de estructuras complejas. Es decir, estructuras que no se pueden resolver de forma analítica (mediante la teoría de Mie comentada anteriormente).

Por lo tanto, se van a reproducir estructuras ya estudiadas para comprender la física que hay detrás del proceso. Además de estudiar estas estructuras, se van a extender a materiales que aún no se han empleado.

Se aplicará el conocimiento adquirido para intentar mejorar los sistemas que ya se emplean actualmente. En concreto, buscando amplificar su anchura espectral de trabajo ( sensor *broadband*).

### 6.1. Esferas

Para comenzar, se realiza un análisis de esferas de diferentes materiales para estudiar sus resonancias. Para ello se aplica una onda electromagnética plana en el eje  $z$  que atraviesa el material de estudio.

Anteriormente se han presentado las resonancias de una esfera de silicio de 436nm (3.2, donde se han explicado los modos de magnéticos y eléctricos [23]). Por lo tanto, se introducen, además del silicio, el fosforo de galio y germanio.

A continuación se muestra una imagen de las resonancias de esferas de diferentes materiales, todas ellas de 300nm de radio.

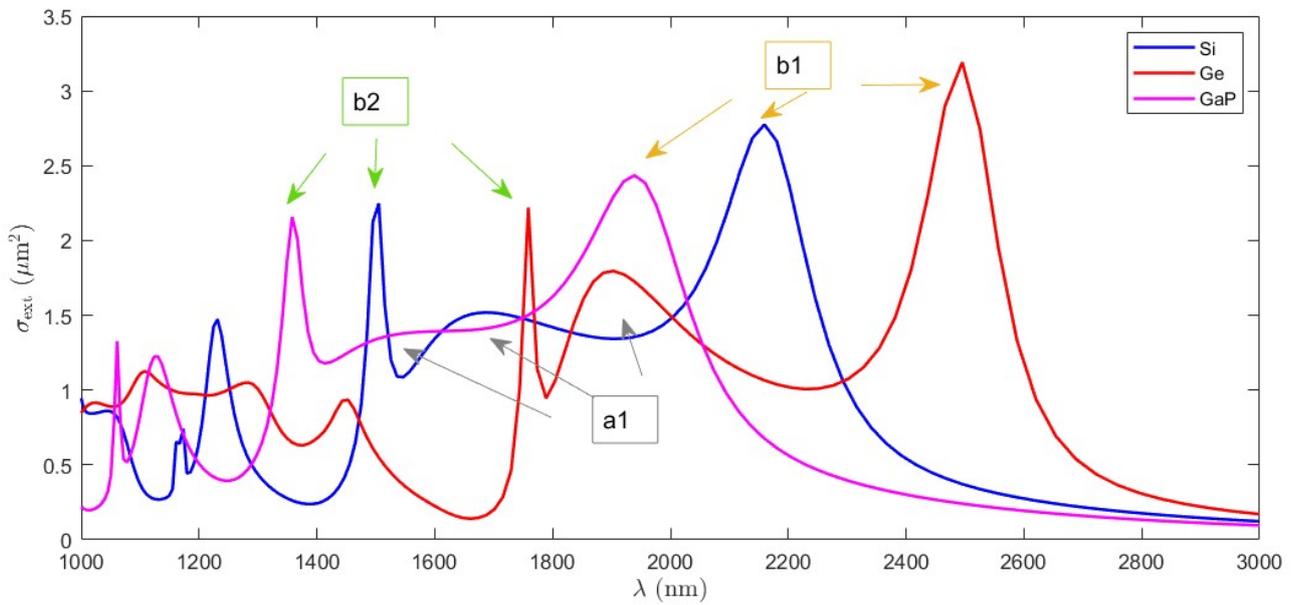


Figura 6.1: Representación de las resonancias de esferas de Si (línea azul), Ge (línea roja) y GaP (línea magenta), todas ellas de radio 300nm.

Como se puede observar en la figura anterior, teniendo de referencia el silicio (Si), las resonancias del fosforo de galio (GaP) se desplazan a su izquierda (yendo hacia el espectro visible), mientras que las del germanio (Ge) van a su derecha (yendo al infrarrojo).

Se han etiquetado específicamente algunos modos de resonancia con anotaciones, lo que permite una identificación más precisa de los picos.

Así se comprueba que al utilizar esferas del mismo tamaño, pero de materiales diferentes, sus resonancias aparecen en unas longitudes de onda u otras. De esta forma, se estudia cómo se pueden sintonizar las resonancias con el material.

## 6.2. Discos

Para las aplicaciones que interesan, fabricar esferas es complicado, sobre todo sobre sustratos; por lo que es interesante estudiar los discos debido a que su fabricación es mucho más sencilla.

Por lo tanto, se va a realizar un análisis de la transición entre la esfera y el disco. Para ello, se estudian las resonancias de discos de silicio del mismo radio (300nm) pero con alturas diferentes.

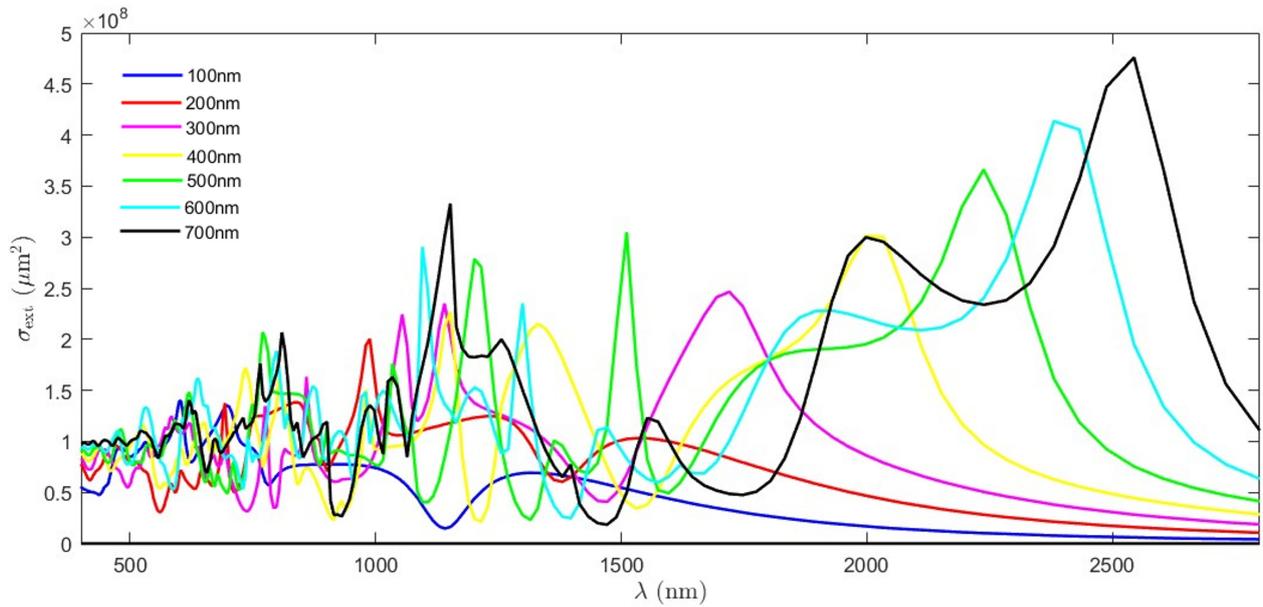


Figura 6.2: Representación de las resonancias de discos de Si de diferentes alturas, todas ellas de radio 300nm.

Como se puede observar, las resonancias se desplazan a la derecha a medida que se aumenta la altura del disco, pareciéndose aún más a la respuesta de una esfera. Para apreciarlo mejor se tienen las siguientes figuras:

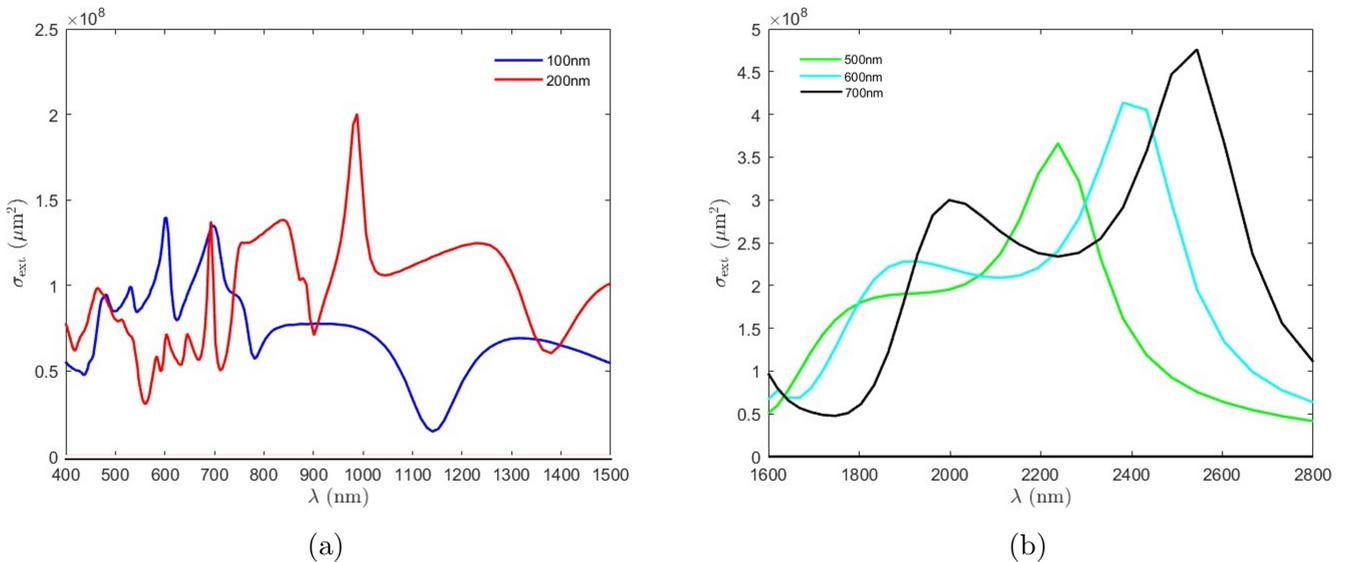


Figura 6.3: (a) Representación de las resonancias de discos de Si de alturas de 100nm y 200nm, todas ellas de radio 300nm, representadas en longitudes de onda desde 400nm y 1600nm. (b) Representación de las resonancias de discos de Si de alturas de 500nm, 600nm y 700nm, todas ellas de radio 300nm, representadas en longitudes de onda desde 1600nm y 2800nm.

Se repite el mismo proceso para los discos. A continuación se muestra una representación de discos de silicio, germanio y fosforo de galio, de radio 300nm y altura 100nm [3].

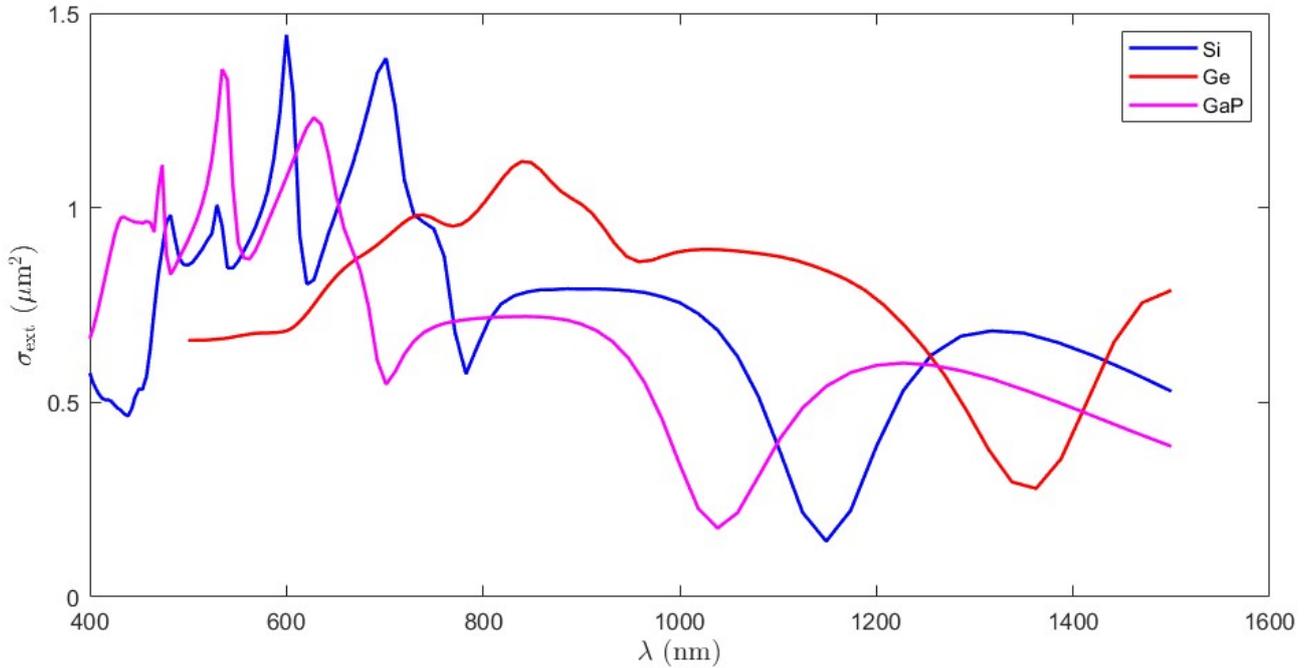


Figura 6.4: Representación de las resonancias de discos de Si (línea azul), Ge (línea roja) y GaP (línea magenta), todas ellas de radio 300nm y altura 100nm.

En la figura anterior se puede volver a ver el mismo comportamiento. El fosforo de galio presenta resonancias desplazadas a la izquierda respecto al silicio y el germanio a la derecha.

### 6.3. Discos con aperturas

Todos los análisis anteriores se han hecho con estructuras que no presentan una respuesta quiral, por lo que se busca generar y amplificar la actividad quiral en la estructura. Para ello, se va a estudiar el comportamiento de un disco con una apertura inclinada en el centro.

La apertura inclinada rompe la simetría del nanodisco, y esto resulta en una densidad quiral ( $C$ ) no nula. Además, la interacción entre las resonancias eléctricas y magnéticas del nanodisco y la región de la apertura amplifica la actividad quiral, aumentando la señal del dicroísmo circular (CD).

Primero se han reproducido los resultados obtenidos en [3], donde se hace el análisis de un disco de silicio de 300nm de radio y 100nm de alto, con una abertura inclinada que es un paralelogramo con una longitud de lado fija de  $w = 400$  nm (paralelo al eje

$x$ ) y separada por  $h = 220$  nm. e inclinación de  $\theta = 15^\circ$ . El disco se encuentra sobre un sustrato de índice de refracción 1.5, que busca amplificar aún más la señal del CD.

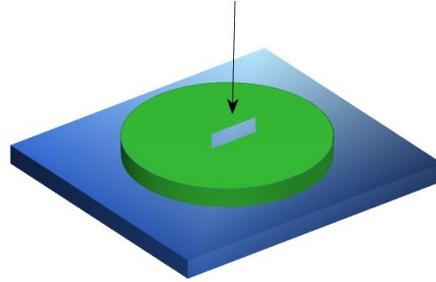


Figura 6.5: Representación del disco con apertura sobre sustrato utilizado. La flecha indica la dirección en la que se aplica la luz.

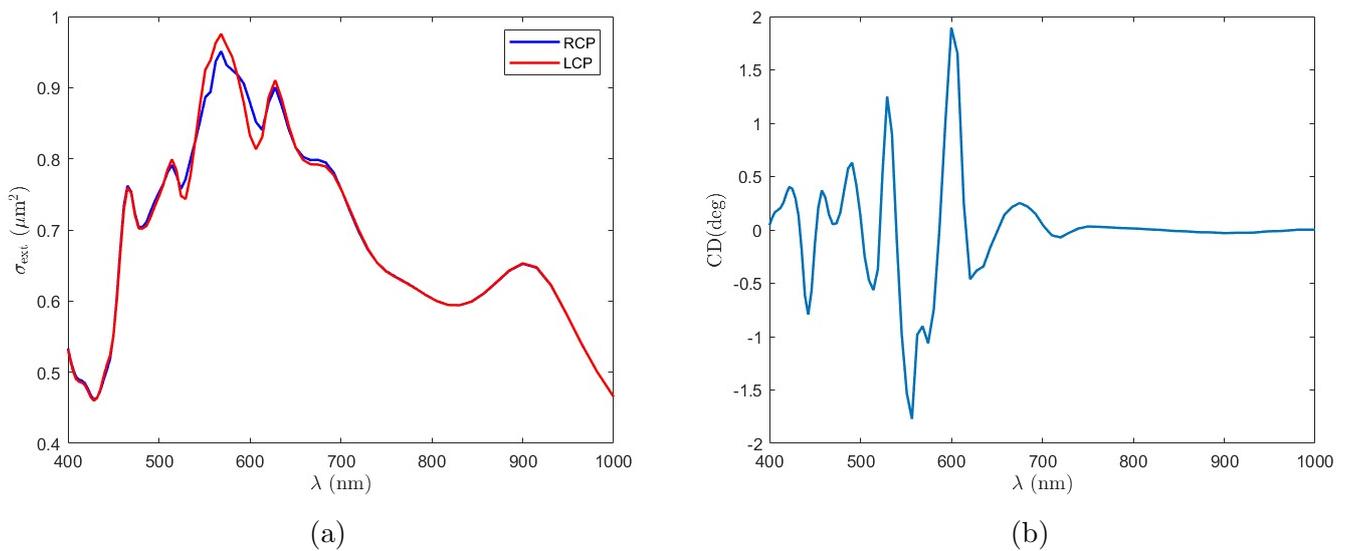


Figura 6.6: (a) Representación de la sección eficaz de extinción del disco de silicio con apertura inclinada sobre un sustrato, diferenciando la luz circularmente dextrógira (RCP) y levógira (LCP). (b) Representación del dichroísmo circular para el disco con apertura inclinada sobre sustrato.

Como se puede observar en la Figura 6.6(a), existe una diferencia entre la respuesta del material para la luz circularmente polarizada a derechas e izquierdas, lo que significa que hay una respuesta quiral en el material. Esto se puede comprobar mejor en la Figura 6.6(b).

Una vez entendido el disco de silicio, se va a proceder a probar el mismo modelo tanto con fosforo de galio como con germanio. A continuación, se muestra una gráfica comparativa con los discos de los tres materiales.

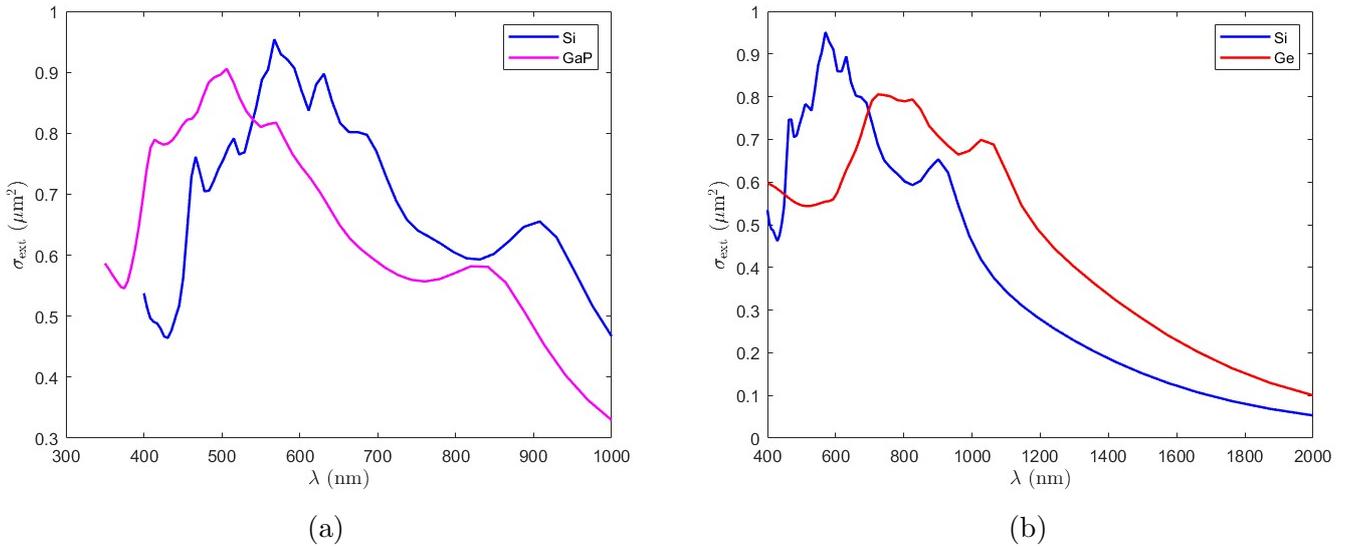


Figura 6.7: (a) Representación de la sección eficaz de extinción del disco con apertura de silicio (línea azul) y fosforo de galio (línea magenta). (b) Representación de la sección eficaz de extinción del disco con apertura de silicio (línea azul) y germanio (línea roja).

Una vez más, se observa el comportamiento esperado, donde las resonancias se desplazan a la derecha o izquierda dependiendo del material utilizado.

## 6.4. Discos dobles

A partir de ahora se realiza una estructura conocida con el nombre de *Janus*, que es una combinación de materiales. Se combina el silicio y el fosforo de galio, buscando que el dicroísmo circular esté más sintonizado hacia longitudes de onda menores y con un ancho de banda mayor.

Para ello, se juntan dos discos con aperturas, colocando uno de silicio encima de uno de fosforo de galio. Cada disco tiene un radio de 300nm, con una altura de 100nm (la altura total del disco es 200nm) sobre un sustrato de vidrio con índice de refracción 1,5. La abertura es un paralelogramo con una longitud de lado fija de  $w = 400$  nm (paralelo al eje  $x$ ) y separada por  $h = 220$  nm. Comentar que se hace uso del sustrato porque es como se trabaja normalmente, además amplifica las resonancias al modificar el entorno dieléctrico.

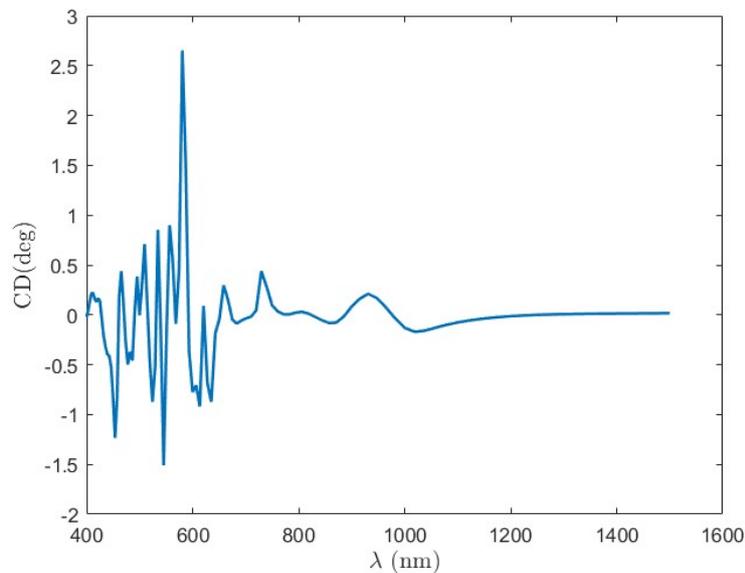


Figura 6.8: Representación del dicroísmo circular del disco doble de silicio y fosfuro de galio con abertura y sobre sustrato de vidrio.

Para hacer un mejor análisis de los resultados se muestran los datos obtenidos del disco con abertura de Si, junto con estos del disco doble de Si y GaP con abertura.

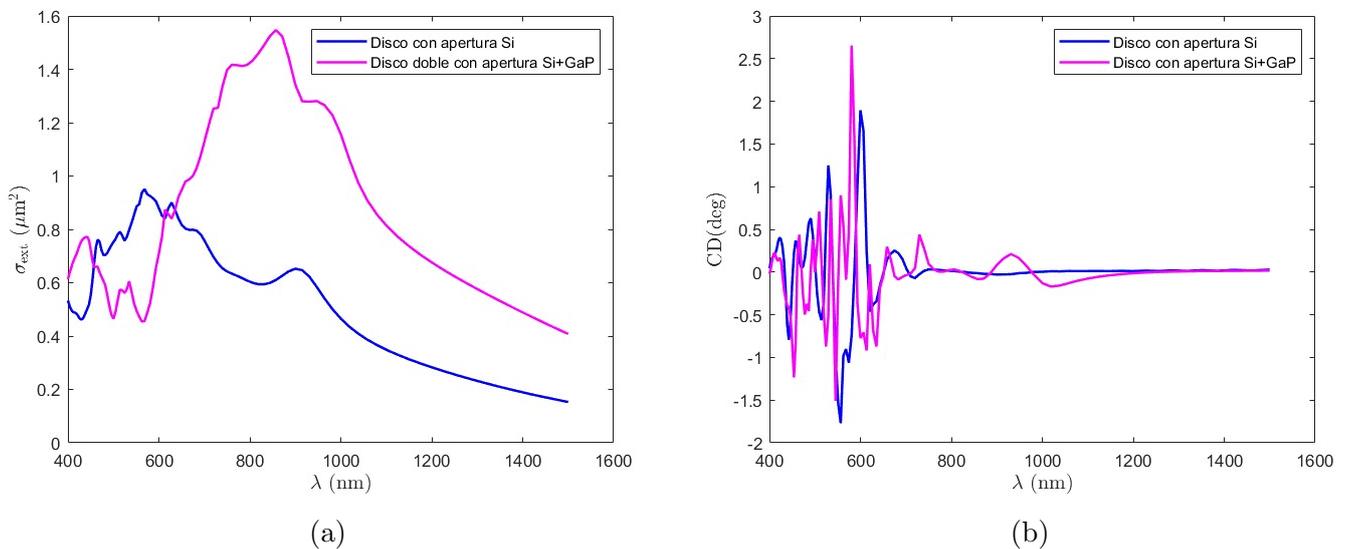


Figura 6.9: (a) Representación de la sección eficaz de extinción del disco de silicio con abertura inclinada sobre un sustrato, y la del disco doble de silicio y fosfuro de galio con la misma abertura. (b) Representación del dicroísmo circular para el disco con abertura inclinada sobre sustrato y la del disco doble de silicio y fosfuro de galio con la misma abertura.

Lo más interesante se encuentra en la Figura 6.9b, donde se observa que al utilizar el disco doble, el dicroísmo circular aumenta hasta un valor de 2.65 grados. Además,

este máximo se desplaza ligeramente a la izquierda, como era de esperar. La mayor amplitud en el CD del disco doble sugiere que la combinación de Si y GaP amplifica la quiralidad, probablemente debido a la interacción de sus campos electromagnéticos en la región de la apertura.

El disco doble tiene una sección eficaz de extinción máxima mayor, lo que sugiere que ha ocurrido una superposición de las resonancias de ambos materiales. La curva del disco doble tiene una cola más extensa, lo que podría ser un indicio de una respuesta espectral más amplia (se acerca al sensor broadband).

Finalmente se muestra la densidad quiral y el factor de disimetría para la longitud de onda donde el dicroísmo circular es máximo (6.8); es decir 580,645nm.

Se han colocado dos monitores, uno en la parte del disco de silicio y otro en el disco de fosforo de galio.

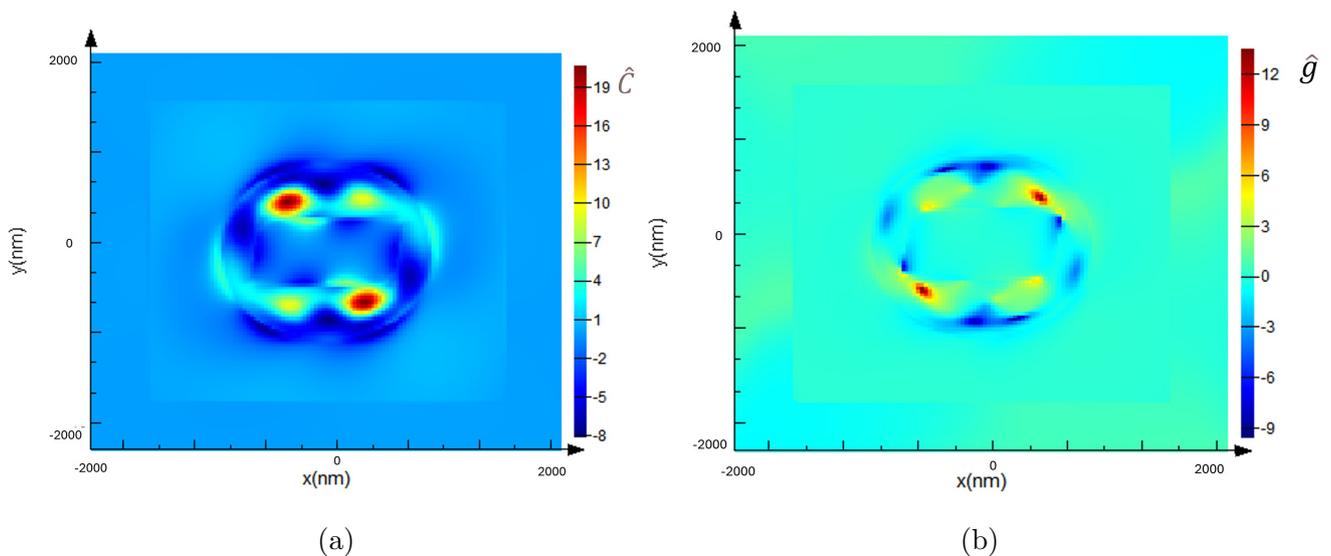


Figura 6.10: (a) Representación de la densidad quiral para el doble disco de silicio y fosforo de galio, visto desde el silicio. La longitud de onda de utilizada es de 580,645nm.(b)Representación del factor de disimetría para el doble disco de silicio y fosforo de galio, visto desde el silicio. La longitud de onda de utilizada es de 580,645nm.

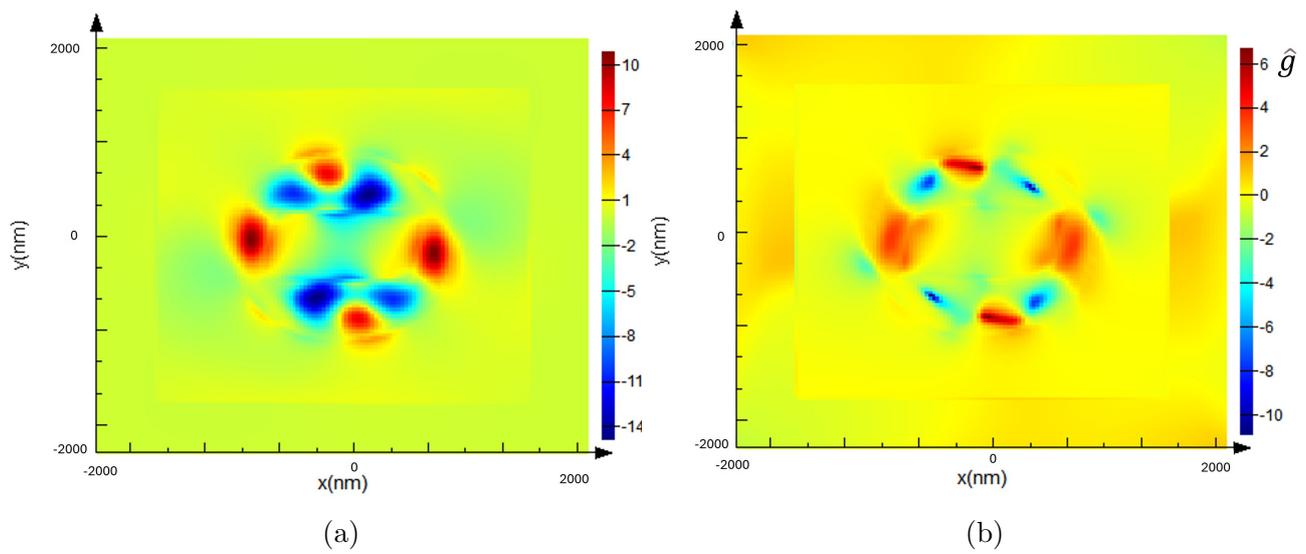


Figura 6.11: (a) Representación de la densidad quiral para el doble disco de silicio y fósforo de galio, visto desde el fósforo de galio. La longitud de onda de utilizada es de 580,645nm.(b)Representación del factor de disimetría para el doble disco de silicio y fósforo de galio, visto desde el fósforo de galio. La longitud de onda de utilizada es de 580,645nm.

Con estas imágenes se detectan las regiones de mayor actividad quiral. Es un resultado preliminar que muestra como claramente todavía admite mucha optimización para encontrar una respuesta mejorada.



# Capítulo 7

## Conclusiones y trabajo futuro

### 7.1. Conclusiones

En este Trabajo Fin de Grado se han estudiado los conceptos y herramientas necesarias para abordar el diseño y caracterización de un biosensor quiral nanofotónico sintonizable, con un enfoque en la detección de enantiómeros en aplicaciones farmacéuticas y biomédicas.

Se han generado resonancias quirales mediante la modificación de la geometría (esferas, discos y discos con aperturas inclinadas) y la selección de materiales como silicio (Si), germanio (Ge) y fosforo de galio (GaP), demostrando que estos factores influyen significativamente en la eficiencia y respuesta quiral del sensor.

El trabajo se ha profundizado en los fenómenos de óptica electromagnética a nanoescala, analizando la polarización de la luz, la interacción luz-materia y las resonancias descritas por la teoría de Mie. Las simulaciones numéricas con el método FDTD (Finite-Difference Time-Domain) permitieron modelar con precisión cómo la luz interactúa con nanoestructuras quirales, validando el enfoque teórico y su aplicabilidad.

Se han empleado métodos de elementos finitos a través del software *Lumerical FDTD* para simular la respuesta electromagnética de las nanoestructuras. Esto permitió optimizar diseños complejos, como el disco doble Janus, que muestra una respuesta espectral más amplia y una mayor sección eficaz de extinción, cumpliendo con el objetivo de estudiar la interacción de la luz con sistemas quirales mediante herramientas computacionales avanzadas.

Además, se ha alcanzado una mayor sensibilidad y selectividad en la detección de parámetros quirales, especialmente al introducir aperturas inclinadas en discos de silicio y estructuras tipo Janus (combinando Si y GaP). Estas modificaciones rompen la simetría, amplificando el dicroísmo circular (CD) hasta un máximo de 2.65 grados, lo que permite distinguir entre enantiómeros en muestras biológicas y garantizar la eficacia y seguridad en aplicaciones biomédicas y farmacéuticas.

## 7.2. Trabajo futuro

Aunque se han logrado los objetivos del trabajo, se dejan abiertas algunas líneas de amplificación del trabajo.

Hablando del disco doble, que es el resultado más novedoso, primero habría que optimizar bien la estructura estudiada. Por ejemplo, sería interesante cambiar el tamaño de uno de los discos con respecto al otro para ver que las resonancias solapan de manera adecuada.

Como bien se ha estudiado, cada uno de los discos presenta las resonancias en una posición. Si se quiere buscar una respuesta broadband y que la señal se amplifique, habría que hacer un estudio del tamaño de los discos, tamaño de la apertura...

Además se pueden estudiar otros materiales, diferentes al silicio, fosforo de galio y germanio que se han empleado en este trabajo. Estos discos de diferentes materiales se pueden combinar dos discos, o incluso tres; buscando que la anchura espectral sea aún más grande.

Estos cálculos requieren bastante tiempo y memoria, por lo que es un área a trabajar, ya que no es el principal objetivo.

Un paso más allá, sería optimizar el sensor, pero en este trabajo se ha demostrado un prototipo.

Los mallados empleados no son lo suficientemente finos como para mostrar toda la respuesta que se puede obtener. Al fin y al cabo, los resultados son aproximados pero convenguen; por lo que son resultados correctos pero dentro de un rango de validez o tolerancia.

Por esta razón, no es una solución analítica, sino que numérica. Dentro de esta solución numérica, se ha marcado una precisión dada. Probablemente se podría conseguir más precisión, con mejores máquinas, más tiempo de análisis. Pero no es el propósito del trabajo.

# Referencias

- [1] Warning, Lauren A., Ali Rafiei Miandashti, Lauren A. McCarthy, Qingfeng Zhang, Christy F. Landes y Stephan Link: *Nanophotonic Approaches for Chirality Sensing*. ACS Nano, 15(10):15538–15566, 2021. <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c04992>, PMID: 34609836.
- [2] Solomon, Michelle L., Amr A. E. Saleh, Lisa V. Poulikakos, John M. Abendroth, Loza F. Tadesse y Jennifer A. Dionne: *Nanophotonic Platforms for Chiral Sensing and Separation*. Accounts of Chemical Research, 53(3):588–598, 2020. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.9b00460>, PMID: 31913015.
- [3] Reyes Gómez, F., Osvaldo N. Jr. Oliveira, Pablo Albella y J. R. Mejía-Salazar: *Enhanced chiroptical activity with slotted high refractive index dielectric nanodisks*. Physical Review B, 101(15):155403, 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.155403>.
- [4] Ho, Chi Sing, Aitzol Garcia-Etxarri, Yang Zhao y Jennifer Dionne: *Enhancing Enantioselective Absorption Using Dielectric Nanospheres*. ACS Photonics, 2016. <http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsp Photonics.6b00701>, Just Accepted Manuscript, publicado en línea el 12 de diciembre de 2016.
- [5] Novotny, Lukas y Bert Hecht: *Principles of Nano-Optics*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2ª edición, 2012, ISBN 9781107005464.
- [6] Li, Nannan, Yunhe Lai, Shiu Hei Lam, Haoyuan Bai, Lei Shao y Jianfang Wang: *Directional Control of Light with Nanoantennas*. Advanced Optical Materials, 9(1):2001081, 2020. <https://doi.org/10.1002/adom.202001081>, Review article.
- [7] Abadeer, Nardine S. y Catherine J. Murphy: *Recent Progress in Cancer Thermal Therapy Using Gold Nanoparticles*. En *Nanomaterials and Neoplasms*, página 75. Jenny Stanford Publishing, 1st edición, 2021, ISBN 9780429027819. Chapter.
- [8] Freire, Noelia: *Las leyes de Maxwell: las cuatro ecuaciones que explican el electromagnetismo*, 2024. [https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/leyes-maxwell-cuatro-ecuaciones-que-explican-electromagnetismo\\_21633](https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/leyes-maxwell-cuatro-ecuaciones-que-explican-electromagnetismo_21633).
- [9] Beléndez, Augusto: *La unificación electromagnética*, 2015. <https://metode.es/revistas-metode/article-revistas/la-unificacio-electromagnetica.html>.

- [10] Hecht, Eugene: *Optics*. Pearson Education Limited, Harlow, England, 5ª edición, 2017, ISBN 978-1-292-09693-3. Global Edition.
- [11] Alcaraz, Marta: *Ecuaciones de Maxwell - Universidad de Murcia*. [https://webs.um.es/jmz/IntroFisiCompu/Alumnos/05\\_Alcaraz\\_Marta/ecmax.html](https://webs.um.es/jmz/IntroFisiCompu/Alumnos/05_Alcaraz_Marta/ecmax.html).
- [12] Ray, M., E. Ruokokoski, S. Kandel, M. Möttönen y D. S. Hall: *Observation of Dirac monopoles in a synthetic magnetic field*. *Nature*, 505:657–660, 2014. <https://doi.org/10.1038/nature12954>.
- [13] Commons, Wikimedia: *Espectro electromagnético (imagen en español)*, 2025. [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Electromagnetic\\_spectrum-es.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Electromagnetic_spectrum-es.svg).
- [14] Serway, Raymond A. y John W. Jewett: *Física para ciencias e ingeniería, Volumen 2*. Cengage Learning, 9ª edición, 2014, ISBN 9786075263439.
- [15] Bianco, Kathrine: *10 Fascinating Facts About Polarization*, 2024. <https://facts.net/science/chemistry/10-fascinating-facts-about-polarization/>.
- [16] Rederer, Matt: *Unveiling the Difference Between Circular and Linear Polarization in MRI: What Are the Effects on Patient RF Exposure?*, 2023. <https://riteadvantage.com/unveiling-the-difference-between-circular-and-linear-polarization-in-mri-what-a>
- [17] Diaz, Mariana Toledano: *Polarización de ondas electromagnéticas*, 2025. <https://fisicotronica.com/polarizacion-de-ondas-electromagneticas/>.
- [18] Lorente, Fernando Chamizo: *Las ecuaciones de Maxwell en plan fácil*. Informe técnico, Universidad Autónoma de Madrid. <https://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/physics/files/monop.pdf>.
- [19] González, Ramsés Eduardo Bautista: *Interacción de luz con metamateriales hiperbólicos*. Tesis de Licenciatura, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada (CICESE), Ensenada, Baja California, 2022. Tesis de Maestría en Ciencias. Asesores: Ricardo Téllez Limón y Eugenio Rafael Méndez Méndez.
- [20] Palomas, David: *El enantiómero bueno, el feo y el malo*, 2012. <https://www.dciencia.es/el-enantiomero-bueno-el-feo-y-el-malo/>, Consultado en junio de 2025.
- [21] Solano-Reynoso, Walter: *Esparcimiento de ondas electromagnéticas por microesferas dieléctricas*. *Revista de Investigación de Física*, 19, 2017.
- [22] Bohren, C.F. y D.R. Huffman: *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley Science Series. Wiley, New York, 2008, ISBN 978-0-471-29340-8.

- [23] García-Etxarri, A., R. Gómez-Medina, L. S. Froufe-Pérez, C. López, L. Chantada, F. Scheffold, J. Aizpurua, M. Nieto-Vesperinas y J. J. Sáenz: *Strong magnetic response of submicron Silicon particles in the infrared*. Opt. Express, 19(6):4815–4826, Mar 2011. <https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-19-6-4815>.
- [24] Jesús Alcañiz, Ernesto de: *El caso de la talidomida*, 2001. <https://edejesus.web.uah.es/lecturas/curiosidades/cur005.htm>, Consultado en la Universidad de Alcalá.
- [25] Martins, Claudia Susana Nunes: *Two enantiomers of glucose: D-glucose (left) and L-glucose (right)*, 2025. [https://www.researchgate.net/figure/Two-enantiomers-of-glucose-glucose-d-glucose-left-and--glucose-l-glucose\\_fig42\\_279512947](https://www.researchgate.net/figure/Two-enantiomers-of-glucose-glucose-d-glucose-left-and--glucose-l-glucose_fig42_279512947), Consultado el 29 de junio de 2025.
- [26] Tang, Y. y A. Cohen: *Optical Chirality and Its Interaction with Matter*. Physical Review Letters, 104(16):163901, 2010.
- [27] Cultura Científica, Cátedra de: *Isómeros del ibuprofeno: A (R-ibuprofeno) y B (S-ibuprofeno)*, 2019. <https://culturacientifica.com/2019/10/31/conversacion-fantastica-con-la-de-los-cosmeticos-sin-toxicos/isomeros-ibuprofeno-a-r-ibuprofeno-b-s-ibuprofeno/>, Consultado en junio de 2025.
- [28] Hou, K., J. Zhao, H. Wang, B. Li, K. Li, X. Shi, K. Wan, J. Ai, J. Lv, D. Wang, Q. Huang, H. Wang, Q. Cao, S. Liu y Z. Tang: *Chiral gold nanoparticles enantioselectively rescue memory deficits in a mouse model of Alzheimer's disease*. Nature Communications, 11(1), 2020. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-18525-2>.
- [29] Utah, Department of Electrical Universidad de y Computer Engineering: *Lecture 14: The Finite-Difference Time-Domain Method (FDTD)*. <https://my.ece.utah.edu/~ece6340/LECTURES/lecture%2014/FDTD.pdf>, Material de clase del curso ECE 6340.
- [30] Pros, J. Anguera y A. Andújar Linares: *Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Maxwell*, n.d. PID\_00175736.
- [31] Commons, Wikimedia: *FDTD Yee grid 2D-3D*, 2025. [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:FDTD\\_Yee\\_grid\\_2d-3d.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:FDTD_Yee_grid_2d-3d.svg), Consultado en junio de 2025.
- [32] Young, D., M. Garza, M. Cantú y P. Perez: *Factores de eficiencia definidos por dispersión de Mie ante partículas y factores ambientales*. Revista Mexicana de Física S, 59(1):69–76, February 2013. Received: 30 de junio de 2011; Accepted: 25 de agosto de 2011.



# Apéndice A

## Teoría de Mie

La dispersión de Mie es una solución exacta de las ecuaciones de Maxwell que describe la interacción de la luz con partículas esféricas de tamaño comparable a la longitud de onda de la radiación incidente.

### A.1. Solución general

Los coeficientes de Mie, se calculan a partir de las condiciones de contorno de la esfera, tienen la siguiente expresión general [32]:

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

$$b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx)[xj_n(x)]' - \mu m j_n(x)[xj_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)]' - \mu m h_n^{(1)}(x)[xj_n(mx)]'} \quad (\text{A.2})$$

donde:

- $j_n$  y  $h_n^{(1)}$  son funciones de Bessel, con el símbolo ' indicando la derivada.
- $x = ka$  es el parámetro de tamaño, con  $k$  el número de onda ( $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ) y  $a$ , el radio de la esfera.
- $m = \frac{n_2}{n_1}$  es el índice de refracción de la esfera relativo al medio, siendo  $n_1$  y  $n_2$  son los índices de refracción del exterior de la esfera y de su interior.
- $\mu$  y  $\mu'$  son las permeabilidades magnéticas relativas del medio y la esfera. Como se ha comentado anteriormente, en este trabajo se tiene que  $\mu = 1$ .

Los términos  $a_n$  son los multipolos eléctricos y los  $b_n$  los magnéticos.

Teniendo en cuenta los coeficientes de Mie, se introducen las funciones  $\vec{N}$  y  $\vec{M}$ , que son los modos normales (la resolución y desarrollo completo se encuentra en [22]). Ahora sí se tienen las siguientes expresiones para el campo dispersado por una esfera:

$$\mathbf{E}_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left( i a_n \mathbf{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \mathbf{M}_{o1n}^{(3)} \right) \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{H}_s = \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left( i b_n \mathbf{N}_{o1n}^{(3)} + a_n \mathbf{M}_{e1n}^{(3)} \right) \quad (\text{A.4})$$

Por lo que las secciones eficaces quedan de la siguiente forma:

$$\sigma_{\text{scat}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (\text{A.5})$$

$$\sigma_{\text{ext}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \Re(a_n + b_n) \quad (\text{A.6})$$

Sin olvidarnos que  $\sigma_{\text{ext}} = \sigma_{\text{scat}} + \sigma_{\text{abs}}$

Como se ha comentado en la sección 3.5.1, cuando la luz interactúa con un material, éste presenta una respuesta mediante modos de resonancia (como se puede observar en la Figura 3.2), que vienen descritos por los modos normales  $\vec{N}$  (modo Transversal Magnético) y  $\vec{M}$  (modo Transversal Eléctrico).

Además, cada coeficiente  $a_n$  (los multipolos eléctricos) y  $b_n$  (los magnéticos) cuantifica la contribución de los modos normales.

## A.2. Aproximación para esferas pequeñas

Cuando la longitud de onda es lo suficientemente grande en comparación con la esfera a estudiar, los coeficientes de Mie tienden a 0 ; por lo que la sección eficaz de extinción también. Así es como las resonancias de mayor orden van disminuyendo, hasta llegar a 0.

Se realiza un desarrollo en serie de los primeros coeficientes:

$$a_1 = -\frac{2ix^3m^2 - 1}{3(m^2 + 2)} - \frac{2ix^5(m^2 - 2)(m^2 - 1)}{5(m^2 + 2)^2} + \frac{4x^6}{9} \left( \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right)^2 + O(x^7) \quad (\text{A.7})$$

$$b_1 = -\frac{ix^5(m^2 - 1)}{45} + O(x^7) \quad (\text{A.8})$$

$$a_2 = -\frac{2ix^5m^2 - 1}{15(2m^2 + 3)} + O(x^7) \quad (\text{A.9})$$

$$b_2 = O(x^7) \quad (\text{A.10})$$

Con estos coeficientes se pueden obtener resultados precisos hasta el orden 6.