

# Cálculo de propiedades ópticas de metamateriales\*

Merlyn Jaqueline Juárez-Gutiérrez y W. Luis Mochán  
Instituto de Ciencias Físicas

7 de noviembre de 2021

## Abstract

We present an introduction to metamaterials, some of their optical properties, and examples of their uses. We develop an efficient theory for the calculation of the macroscopic permittivity of binary systems and systems with more components, in the non-retarded case and in the general case, and we present its implementation in a computational package and illustrate its use. We discuss some applications regarding the design of optimized nanostructured optical devices and we discuss the linear and non-linear properties obtained.

## Resumen

Presentamos una introducción a los metamateriales, algunas de sus propiedades ópticas y ejemplos de sus usos. Desarrollamos una teoría eficiente para el cálculo de su permitividad macroscópica en sistemas binarios o con más componentes, en el caso no retardado y en el caso general, y presentamos su implementación en un paquete computacional y su uso. Finalizamos discutiendo algunas aplicaciones del mismo para el diseño de dispositivos ópticos nanoestructurados optimizados y discutimos las propiedades lineales y no lineales obtenidas.

## 1 Introducción

Un metamaterial es un material artificial formado por dos o más materiales alternados. Los metamateriales se pueden definir como *un arreglo de elementos estructurales artificiales, diseñados para alcanzar propiedades electromagnéticas ventajosas e inusuales*[1], de acuerdo al *Virtual Institute for Artificial Electromagnetic Materials and Meta-Materials*. Dichas propiedades están determinadas por sus constituyentes básicos, a los que se denomina ocasionalmente como *meta-átomos*, los cuales son objetos hechos de materiales usuales, así como por su forma y disposición, y pueden ser muy distintas a las de los materiales que los conforman, llegando a ser muy exóticas. Pueden ser diseñadas y entonadas escogiendo las formas, estructuras

---

\*Curso presentado en la XXVIII Escuela de Verano en Física, ICF- e IF-UNAM, Cuernavaca, Mor. y Cd de México, junio 21-julio 2, 2021

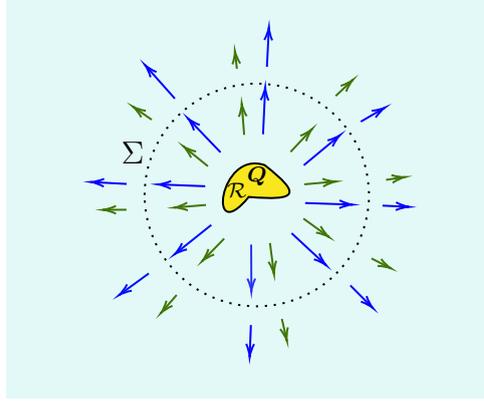


Figura 1: Acumulación de carga  $Q$  en cierta región  $\mathcal{R}$  dentro de un conductor homogéneo, rodeada por una superficie  $\Sigma$  sobre la cual se aplica la ley de Gauss al campo producido por  $Q$ , campo que produce una densidad de corriente que fluye a través de  $\Sigma$ . La corriente modifica  $Q$  conforme transcurre el tiempo  $t$  produciendo oscilaciones de plasma.

internas, tamaños, orientaciones mutuas, etc., de sus meta-átomos. Sus funciones repuesta pueden ser modificadas mediante señales externas e internas y pueden ser controladas mediante microprocesadores programables.[2]

## 1.1 Materiales plasmónicos

Si un metamaterial tiene componentes metálicos, estos pueden presentar resonancias asociadas a los movimientos oscilatorios colectivos de sus electrones de conducción, denominados de acuerdo a sus características como plasmones de bulto, de superficie o localizados. La frecuencia de estos movimientos en un sistema infinito se denomina como frecuencia de plasma  $\omega_p$ . Para estimarla, considere el modelo más simple de un conductor, un gas de electrones que en equilibrio tienen una densidad de número  $n_0$ , y que son libres de moverse en un entorno positivamente cargado, de manera que el sistema en equilibrio sea neutro. Si debido a alguna compresión o rarefacción del gas de electrones se produjera una acumulación de carga  $Q$  localizada en alguna región  $\mathcal{R}$ , ésta produciría un campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ , como ilustra la figura 1. De acuerdo a la segunda ley de Newton, los electrones adquirirían una aceleración  $d^2\mathbf{r}/dt^2 = -e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)/m$ , donde  $m$  y  $-e$  son la masa y la carga eléctrica. La velocidad adquirida por los electrones resultaría en una corriente eléctrica  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -n_0e\mathbf{v} = -n_0e(d\mathbf{r}/dt)$  que obedece la ecuación de movimiento,  $\partial\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)/\partial t = -\frac{n_0e^2}{m}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ . Integrando la ecuación diferencial de la corriente sobre una superficie  $\Sigma$  que rodee completamente la carga y usando la ecuación de continuidad y la Ley de Gauss para el campo eléctrico obtenemos una ecuación diferencial para la carga  $Q$  encerrada en  $\Sigma$ ,

$$\frac{d^2Q}{dt^2} = -\frac{4\pi n_0 e^2}{m}Q, \quad (1)$$

la cual es una ecuación diferencial idéntica a la de un oscilador armónico simple como el que se ilustra en la fig. 2. Sustituyendo la Ley de Hooke  $F = -ky$  en la segunda

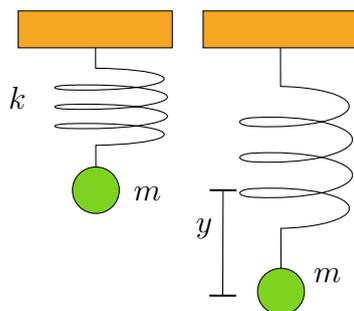


Figura 2: Oscilador armónico de masa  $m$  y constante  $k$  en su posición de equilibrio y desplazado una distancia  $y$ .

ley de Newton  $ma = F$  para un oscilador con constante  $k$  y masa  $m$ , obtenemos [3]

$$\frac{d^2y}{dt^2} = -\omega^2 y, \quad (2)$$

donde  $\omega = \sqrt{k/m}$ , y cuya solución,  $y(t) = y_0 \cos(\omega t + \phi_0)$  es un movimiento periódico con una frecuencia  $\omega$  que depende de  $k$  y  $m$ . Comparando las ecs. (1) y (2) notamos que puede existir carga en el seno de nuestro metal modelo, pero ésta oscilaría con la *frecuencia de plasma*  $\omega_p$  dada por

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n_0 e^2}{m}. \quad (3)$$

La repulsión mutua entre electrones los impulsa lejos de regiones en que haya una densidad electrónica excedente, por arriba de su valor nominal. El movimiento consecuente prosigue aun después de que el sistema se neutraliza debido a la inercia electrónica, que los hace proseguir su camino hasta que en la región original disminuye tanto la densidad de electrones que aparezca una carga neta positiva que frena a los electrones en fuga y los hace regresar, hasta que su repulsión mutua los frena, habiendo regresado a la configuración inicial. Este proceso se repite periódicamente y su frecuencia  $\omega_p$  está relacionada con la repulsión coulombiana, proporcional a  $e^2$ , la densidad de número electrónica  $n_0$  y la inercia electrónica caracterizada por  $m$ .

En lugar de un medio infinito, consideremos ahora un medio semiinfinito separado del vacío por una superficie plana. Un análisis análogo nos permite obtener la frecuencia del *plasmón de superficie*, considerando ahora un exceso de carga  $Q$  en una región  $\mathcal{R}$  en la interfaz, como ilustra la fig. 3, el cual produce un campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  que induce corrientes en el conductor.

Usando la ecuación dinámica de la densidad de corriente podemos escribir la ecuación dinámica de la carga como hicimos en el caso del plasmón de bulto, con la diferencia que la densidad de corriente en este caso sólo fluye a través de la mitad

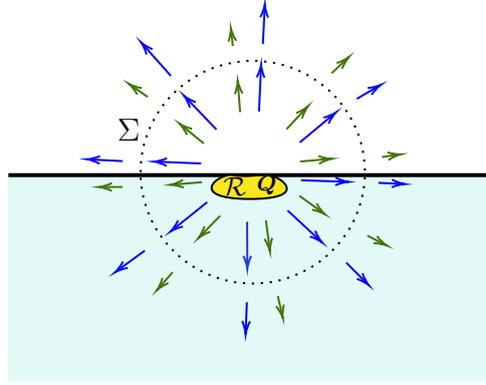


Figura 3: Región  $\mathcal{R}$  en la superficie de un conductor semi-infinito en la que hay una carga  $Q$ , la cual produce un campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  (líneas azules) y éste a su vez produce una densidad de corriente (líneas verdes) que atraviesan aquella parte de la superficie lejana  $\Sigma$  que se halla dentro del conductor.

$\Sigma/2$  de la superficie  $\Sigma$  que se halla en el interior del metal,

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2}{dt^2}Q &= - \int_{\Sigma} d\mathbf{a} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j}, \\
 &= ne \int_{\Sigma/2} d\mathbf{a} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}, \\
 &= \frac{1}{2} \frac{ne^2}{m} \int_{\Sigma} d\mathbf{a} \cdot \mathbf{E}, \\
 &= - \frac{2\pi ne^2}{m} Q.
 \end{aligned} \tag{4}$$

Comparando esta ecuación con la ec. (2) identificamos la frecuencia del *plasmón de superficie*  $\omega_{sp}$ , dada por

$$\omega_{sp}^2 = \frac{2\pi ne^2}{m} = \frac{\omega_p^2}{2}. \tag{5}$$

En lugar de un sistema semiinfinito, consideremos ahora un sistema finito consistente en una partícula metálica separada del vacío por una superficie esférica. Supongamos que perturbamos esta esfera moviendo todos sus electrones una separación  $\zeta$  respecto a su posición de equilibrio, lo cual induce una polarización  $\mathbf{P} = -n_0 e \zeta$ , como ilustra la fig. 4, El desplazamiento de los electrones hacia uno de los hemisferios de la esfera genera un exceso de carga negativa en su superficie y un exceso de carga positiva en el otro, descrita por la densidad de carga superficial  $\sigma = \mathbf{P} \cdot \hat{n}$ , donde  $\hat{n}$  es un vector unitario radial. Estas cargas producen un campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -(4\pi/3)\mathbf{P}$  donde empleamos el *factor de despolarización*  $-4\pi/3$  de una esfera. Este campo acelera las cargas de acuerdo a  $m d^2 \zeta / dt^2 = -e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ . Escribiendo al campo en términos de  $\zeta$ ,  $\mathbf{E} = -(4\pi n_0 e^2 / 3m) \zeta$ , la ecuación de movimiento para  $\zeta$  se convierte en,

$$\frac{d^2 \zeta}{dt^2} = - \frac{4\pi n_0 e^2}{3m} \zeta \tag{6}$$

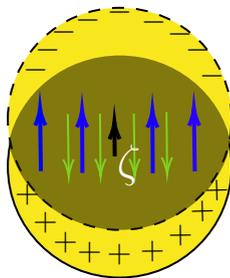


Figura 4: Esfera metálica cuyos electrones han sido desplazados en la dirección de  $\zeta$  (flecha negra), dejando una ausencia de carga en la dirección opuesta induciendo polarización en el sistema  $\mathbf{P}$  (flechas verdes) y una carga superficial la cual produce un campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  (flechas azules).

de la cual obtenemos la frecuencia  $\omega_d$  de las oscilaciones de carga en una esfera, a las que se les denominan como *plasmón dipolar*,

$$\omega_d^2 = \frac{4\pi n e^2}{3m} = \frac{\omega_p^2}{3}. \quad (7)$$

Estos ejemplos muestran que en un metal los electrones pueden animarse de movimientos colectivos asociados a ciertas frecuencias de resonancia, las cuales a su vez dependen de la geometría, como ilustramos estudiando el caso de un sistema infinito, uno semiinfinito y una esfera. Más aún, si colocamos las partículas metálicas en el seno de una matriz dieléctrica habría un corrimiento adicional en su frecuencia de resonancia debido a las cargas inducidas en la superficie del dieléctrico. Si además hubiese un gran número de esferas, sus interacciones mutuas a través de los campos electromagnéticos inducidos podrían generar corrimientos adicionales de las resonancias.

Un ejemplo excepcional de las propiedades que emergen al generar *metamateriales* es la copa de Licurgo, una copa de cristal tallada en la época romana tardía, decorada con un friso que muestra escenas del mito del Rey Licurgo. La copa que data del siglo IV, D.C., se produjo a partir de una pieza en bruto de vidrio soplado de unos 15mm de espesor. Las figuras se cortaron, rectificaron y unieron a la pared del recipiente mediante pequeños puentes de vidrio. Aparte del trabajo artístico realizado en la decoración, la copa es de gran interés por las propiedades ópticas que muestra. El vidrio se ve de un color rojo-vino profundo cuando la luz lo atraviesa y de un color verde opaco cuando la luz que llega a nuestros ojos es reflejada por su superficie, como muestra la fig. 5. A este fenómeno se le denomina *dicroísmo*, y de los artefactos de vidrio romano encontrados, la copa es la que muestra dicho efecto más intensamente. [4] Estudios de la composición del vidrio muestran que tales propiedades son causadas por la presencia de finas partículas de oro, probablemente en una aleación con plata, dispersadas. Con estudios de microscopía de transmisión de electrones, TEM, por sus siglas en inglés, se pudieron determinar tamaños de las partículas de  $\approx 10nm$ . Se ha encontrado que contiene además partículas de diferentes metales y de materiales no metálicos. El color se debe al espectro de reflexión y de transmisión del medio compuesto formado por vidrio y por las partículas metálicas.



Figura 5: Copa de Licurgo, fabricada en la Roma tardía del siglo IV D.C., cuya fabricación resultante muestra propiedades ópticas excepcionales. Es una taza para beber de vidrio que se ve verde o roja, dependiendo de cómo es iluminada. ©The Trustees of the British Museum.

Aunque el oro es amarillo, las partículas de oro embebidas en una matriz de vidrio e interaccionando entre sí producen un color rojo.

## 1.2 Otras geometrías

Si consideráramos partículas con otras geometrías habría otras resonancias asociadas a la excitación de modos con varios patrones de distribución de carga. Por ejemplo, en la figura 6 mostramos resultados experimentales y los primeros resultados teóricos para los modos electromagnéticos esperados en pequeños cubos de sal [5], sus frecuencias de resonancia y su distribución asociada de carga superficial. En este caso se encontraron en lugar de un modo dipolar, como vimos para el caso de la esfera, seis modos principales y unos modos adicionales con poca fuerza de oscilador, con una polarización cuya distribución espacial muestra bastante riqueza.

## 1.3 Cristales fotónicos

Consideremos ahora un dieléctrico transparente no dispersivo homogéneo, como en la figura 7. La relación de dispersión de la luz en este medio está dada por  $k^2 = \epsilon\omega^2/c^2$  que corresponde a las dos rectas mostradas en la (fig. 7d). Si en vez de un dieléctrico homogéneo tuviéramos un cristal artificial formado por películas de dos materiales alternados (fig. 7b), el ímpetu y el vector de onda ya no serían cantidades conservadas. Las reflexiones múltiples en las interfaces producirían ondas esparcidas en que el vector de onda cambiaría  $k \rightarrow k + 2\pi n/d$  para enteros positivos y negativos  $n$  (fig. 7e), dando lugar a puntos de degeneración en que se cruzan las distintas réplicas de la relación de dispersión. El acoplamiento entre los campos esparcidos rompe la degeneración y abre *brechas fotónicas* evitando los cruces y dando origen a una relación

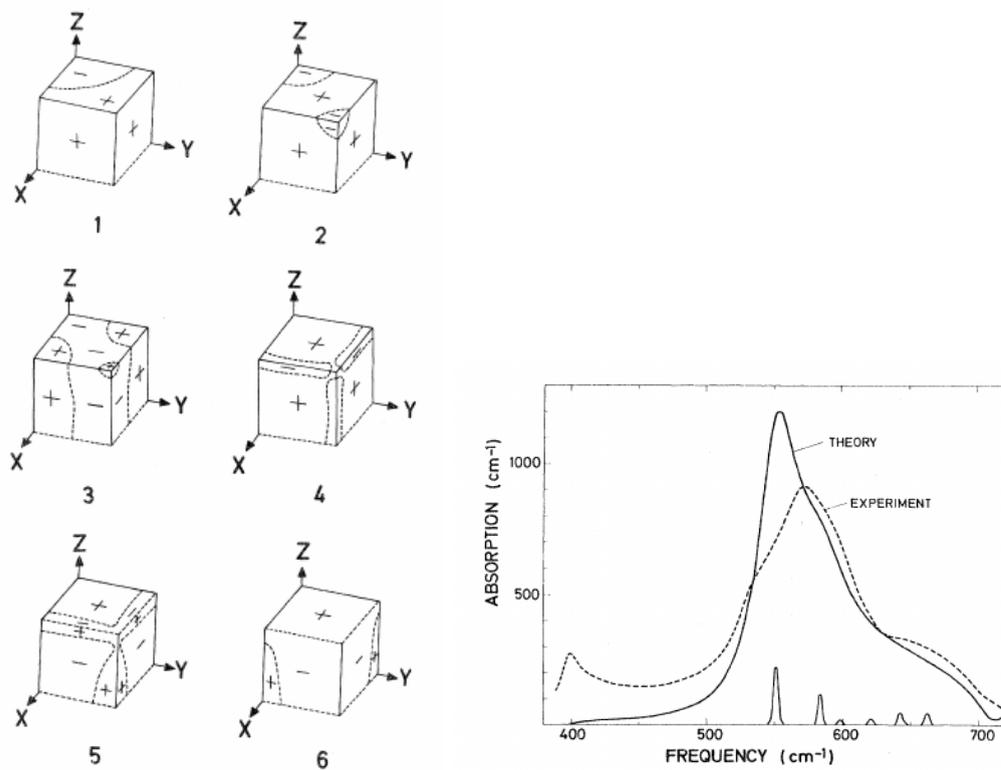


Figura 6: Modos resonantes de un cristal de sal y espectro de absorción teórico y experimental. Los signos del lado izquierdo indican la polarización en una de las ocho esquinas del cubo de sal correspondiente para cada uno de los seis modos principales. La posición y peso de cada resonancia se ilustran con las pequeñas gaussianas en la base del panel derecho, las cuales generan el espectro teórico al escalarse, ensancharse y sumarse.

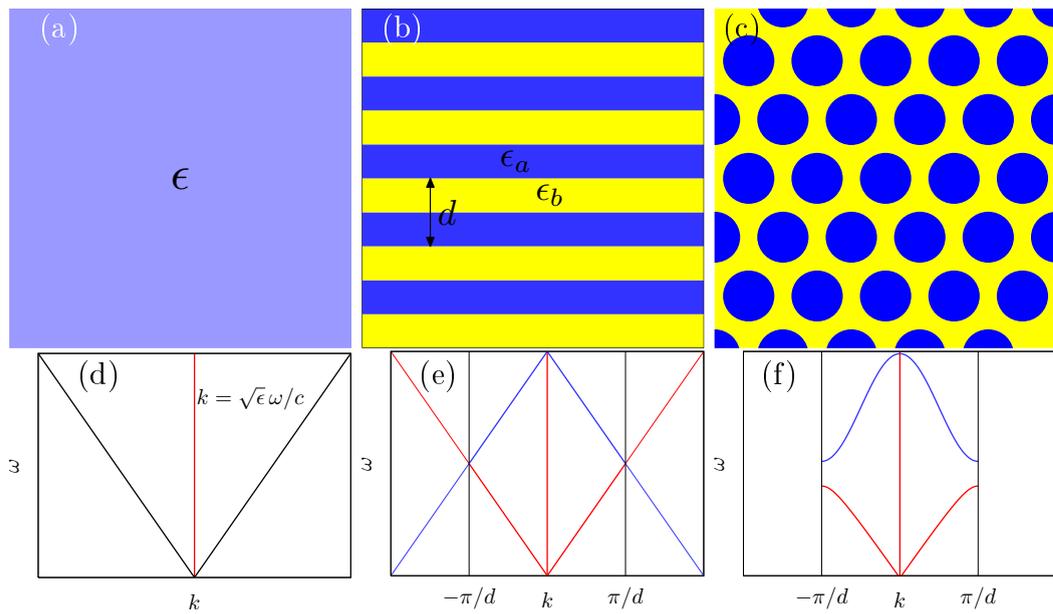


Figura 7: (a) Medio dieléctrico homogéneo con respuesta  $\epsilon$ , (b) cristal fotónico unidimensional con funciones respuesta  $\epsilon_a$  y  $\epsilon_b$  y periodo  $d$ , y (c) cristal fotónico con periodicidad en más dimensiones. (d) Relación de dispersión  $\omega$  vs  $k$  de la luz del medio homogéneo. (e) Relaciones de dispersión trasladadas por  $0, \pm 2\pi/d$  en el espacio recíproco mostrando cruzamientos en el borde de la zona de Brillouin  $k = \pm\pi/d$ . (f) El acoplamiento abre una brecha en los puntos de degeneración evitando el cruce y formando brechas prohibidas.

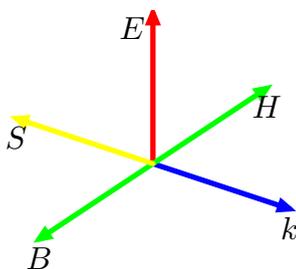


Figura 8: Relación entre las direcciones del campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , densidad de flujo magnético  $\mathbf{B}$ , vector de onda  $\mathbf{k}$ , campo magnético  $\mathbf{H}$  y vector de Poynting  $\mathbf{S}$  en un metamaterial izquierdo isotrópico. Como  $(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{k})$  y  $(\mathbf{E}, \mathbf{H}, \mathbf{S})$  son triadas ordenadas derechas, y  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{H}$  son antiparalelos, entonces  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{S}$  son antiparalelos.

de dispersión (fig. 7f) organizada en *bandas fotónicas* análogas a las bandas electrónicas que describen la propagación de electrones en sólidos cristalinos. Algo similar sucedería si la periodicidad fuese bidimensional o tridimensional (fig. 7c) en cuyo caso podrían producirse brechas omnidireccionales en las que la luz no se propaga en ninguna dirección. Las brechas fotónicas explican algunos fenómenos naturales, como la iridiscencia en los caparzones de diversos insectos y los colores de las alas de las mariposas, colores producidos no por pigmentos que absorben la luz, sino por pequeñas estructuras dieléctricas transparentes que forman cristales fotónicos con regiones de frecuencia en que la luz es fuertemente reflejada por corresponder a brechas en que no se puede propagar. Estos colores se llaman por su origen *colores estructurales*. Introduciendo *defectos* en cristales fotónicos se pueden generar sitios en que la luz puede ser atrapada, hecho que ha encontrado aplicaciones tales como la elaboración de fibras ópticas fotónicas.

## 1.4 Materiales izquierdos

Consideremos ahora un material cuya permitividad  $\epsilon(\omega)$  dependa de la frecuencia y tenga un comportamiento resonante. La relación de dispersión  $k^2 = \epsilon\omega^2/c^2$  implica que al pasar la resonancia, cuando  $\epsilon$  adquiere valores negativos,  $k$  se vuelve imaginario y la luz no puede propagarse. Esto explica la aparición del color en los materiales comunes, en que hay frecuencias características de cada material en que absorben luz y justo arriba hay frecuencias en que no se puede propagar. Si el material tuviera además una respuesta magnética  $\mu \neq 1$  la relación de dispersión cambiaría a  $k^2 = \epsilon\mu\omega^2/c^2$ . Si tanto  $\epsilon$  como  $\mu$  tuvieran resonancias cercanas, arriba de éstas podría suceder que ambas fueran negativas,  $\epsilon < 0$  y  $\mu < 0$ . En este caso, su producto  $\epsilon\mu > 0$  sería positivo y sí podría haber propagación con un vector de onda real. Sin embargo, esta propagación sería curiosa. A partir de las ecuaciones de Maxwell, por ejemplo, de las leyes de Faraday y de Gauss magnética, sabemos que para una onda plana, el campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , la densidad de flujo magnético  $\mathbf{B}$  y el vector de onda  $\mathbf{k}$  forman una triada ordenada derecha, como ilustra la figura 8. Sin embargo, la definición del vector de Poynting y la ley de Ampère-Maxwell implican que el campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , el campo magnético  $\mathbf{H}$  y el flujo de energía  $\mathbf{S}$  también forman

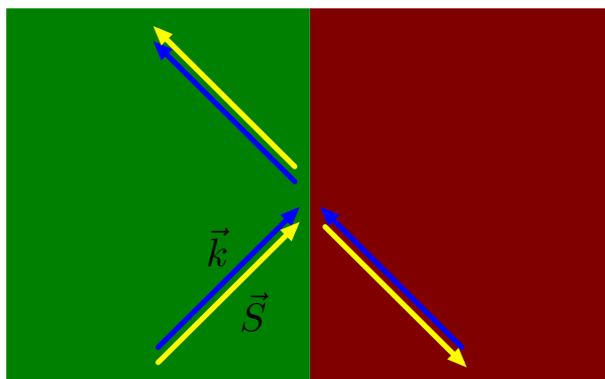


Figura 9: Una onda incide desde un medio normal (verde) sobre la interfaz que lo separa de un medio con permitividad y permeabilidad negativas (rojo). Se muestran esquemáticamente las direcciones de los vectores de onda (flechas azules) y de los vectores de Poynting (flechas amarillas) de las ondas incidente, reflejada y transmitida. La proyección sobre la interfaz de los tres vectores de onda debe coincidir. El flujo de energía de la onda transmitida debe alejarse de la interfaz. Por ello, la componente normal del vector de onda transmitido apunta hacia la interfaz.

una triada ordenada derecha. Sin embargo, si  $\mu < 0$ , entonces  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{H}$  apuntan en direcciones opuestas. Luego,  $\mathbf{S}$  ¡apunta en la dirección opuesta a  $\mathbf{k}$ ! La dirección en que avanza la fase de la onda es opuesta a la dirección en que avanza la energía. Esto sólo puede ser posible si la velocidad de grupo es opuesta a la velocidad de fase. Una consecuencia curiosa de este resultado se manifiesta cuando una onda se refracta en una superficie plana. La ley de conservación del ímpetu asociada a una simetría translacional implica que las proyecciones del vector de onda  $\mathbf{k}_{\parallel}$  a lo largo de la superficie deben coincidir para las ondas reflejada, transmitida e incidente. De aquí se derivan las leyes de la reflexión y de Snell. Sin embargo, la *causalidad* requiere que las ondas esparcidas por la superficie, la onda incidente y la onda reflejada, deben tener un flujo de energía que se aleja de la superficie. Ello implica que cuando incide luz desde un medio ordinario hacia un medio con  $\epsilon < 0$  y  $\mu < 0$ , la componente normal del vector de onda de la onda transmitida ¡debe apuntar hacia la superficie!, como ilustra la fig. 9. De esta figura podemos inferir que una onda que incide viajando hacia arriba se refracta hacia abajo y viceversa. Eso lleva a plantear dispositivos como el ilustrado en la fig. 10, consistente en una película plana de un metamaterial izquierdo con  $\epsilon < 0$  y  $\mu < 0$ . La luz que emerge de una fuente puntual y viaja hacia la derecha y hacia arriba se refracta hacia abajo mientras que luz que viaja hacia abajo se refracta hacia arriba. Algo análogo sucede al emerger de la película. Es posible entonces que todos los rayos que parten de la fuente luminosa converjan en un punto, la imagen de la fuente formada por una lente plana.

Desafortunadamente, no existen materiales naturales en los que tanto la permitividad como la permeabilidad sean negativas a la misma frecuencia. Sin embargo, hay metamateriales artificiales que pueden describirse por una permitividad y permeabilidad efectiva que sí cumplan esta condición. La figura 11 muestra un ejemplo formado por un arreglo de parejas de anillos interrumpidos que funcionan como un circuito LC resonante. La corriente recorriendo los anillos produce un dipolo mag-

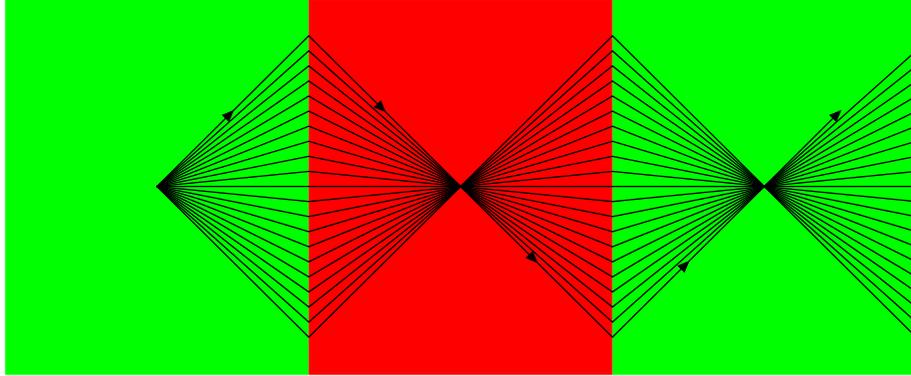


Figura 10: Lente consistente en una película plana de un metamaterial izquierdo (rojo) en el seno de un material ordinario (verde). Se ilustra la trayectoria de varios rayos que emergen de una fuente puntual de luz y convergen en un punto imagen.

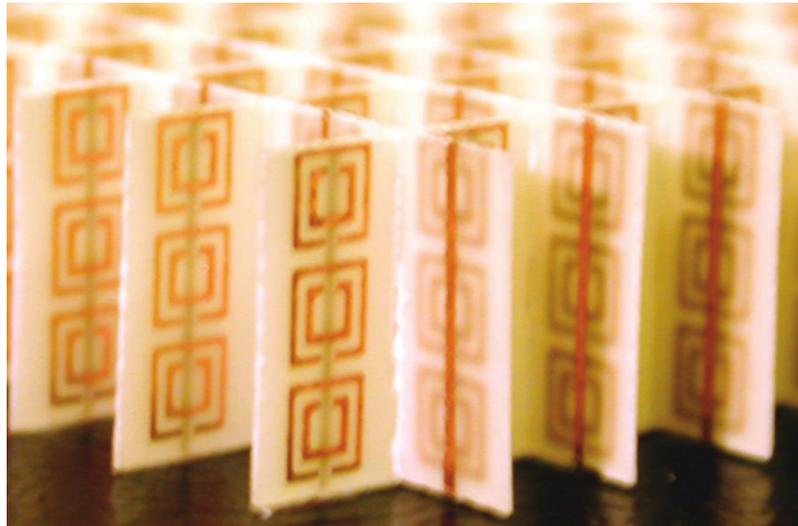


Figura 11: Metamaterial izquierdo formado por una red de parejas de anillos conductores interrumpidos (*split rings*) y pistas conductoras rectas sobre un dieléctrico. (Tomada de la ref. [6])

nético, y debido a su interrupción, produce una acumulación de cargas que lo acopla con el otro anillo. Este circuito tiene una resonancia arriba de la cual la permeabilidad macroscópica es negativa. Por otro lado, una serie de pistas rectas permiten que el material se comporte en la dirección vertical como un conductor, por lo cual la permitividad es negativa abajo de la frecuencia de plasma efectiva.

## 1.5 Partículas dieléctricas

Hemos visto arriba que partículas metálicas pequeñas pueden tener resonancias plasmónicas cuyas frecuencias dependen en general de su composición y de su geometría. También partículas dieléctricas pueden tener resonancias aunque estén formadas por materiales no dispersivos, siempre y cuando la longitud de onda de la luz en su interior sea conmensurable con su tamaño. Estas resonancias se deben a la interferencia constructiva entre ondas múltiplemente reflejadas por sus superficies. Por ejemplo, partículas esféricas o cilíndricas muestran *resonancias de Mie* cuando el perímetro de su sección transversal es cercano a un múltiplo de la longitud de onda. Una ventaja de estas resonancias sobre las resonancias plasmónicas para diseñar y construir dispositivos fotónicos es que las pérdidas de energía debidas a la absorción dentro del material son menores que las pérdidas óhmicas que suelen mostrar los metales. Sin embargo, estas resonancias requieren que las partículas tengan un tamaño relativamente grande conmensurable con la longitud de onda en su interior. Sin embargo, si se emplean materiales con un índice de refracción alto, la longitud de onda dentro de estos materiales puede ser mucho menor que la correspondiente al espacio vacío, permitiendo así resonancias dieléctricas en partículas de tamaño muy pequeñas, en analogía a las resonancias plasmónicas.

## 1.6 Metasuperficies

Las funciones respuesta de una partícula cambian de signo conforme la frecuencia de la luz pasa de ser menor a ser mayor a su frecuencia de resonancia. Por tanto, la fase que adquiere un haz luminoso al pasar a través de una superficie cubierta por partículas depende muy sensiblemente de la cercanía de la frecuencia a la frecuencia de resonancia de las partículas, la cual a su vez, depende de la geometría. Por tanto, modulando la geometría de las partículas a lo largo de la superficie, puede modularse la fase que adquiere la luz en forma análoga a como el ancho variable de una lente o de un prisma modula la fase de los rayos de luz que los atraviesan.

La ley de Snell usual implica que a lo largo de una interfaz uniforme hay un empatamiento de fases  $\phi^\alpha(\mathbf{r}_\parallel) = \mathbf{k}_\parallel^\alpha \cdot \mathbf{r}_\parallel$  entre la onda incidente, la onda reflejada y la onda transmitida, por lo cual los vectores de onda  $\mathbf{k}_\parallel^\alpha$  proyectados sobre la superficie son iguales para las tres ondas  $\alpha = i, r, t$ . Sin embargo, si la superficie no es uniforme y a lo largo de ésta la onda transmitida y/o reflejada adquiere una fase adicional  $\psi^\alpha(\mathbf{r}_\parallel)$  a la de la onda incidente,  $\phi^\alpha(\mathbf{r}_\parallel) = \mathbf{k}_\parallel^i \cdot \mathbf{r}_\parallel + \psi^\alpha(\mathbf{r}_\parallel) \approx (\mathbf{k}_\parallel^i + \nabla_\parallel \psi^\alpha(0)) \cdot \mathbf{r}_\parallel$  la ley de Snell debe generalizarse,

$$\mathbf{k}_\parallel^\alpha = \mathbf{k}_\parallel^i + \nabla_\parallel \psi^\alpha, \quad (\alpha = r, t) \quad (8)$$

i.e., el ímpetu paralelo a la interfaz adquiere una contribución debida a la variación de la fase adicional  $\psi^\alpha$ . Por lo tanto, modulando la fase de una onda a lo largo de una

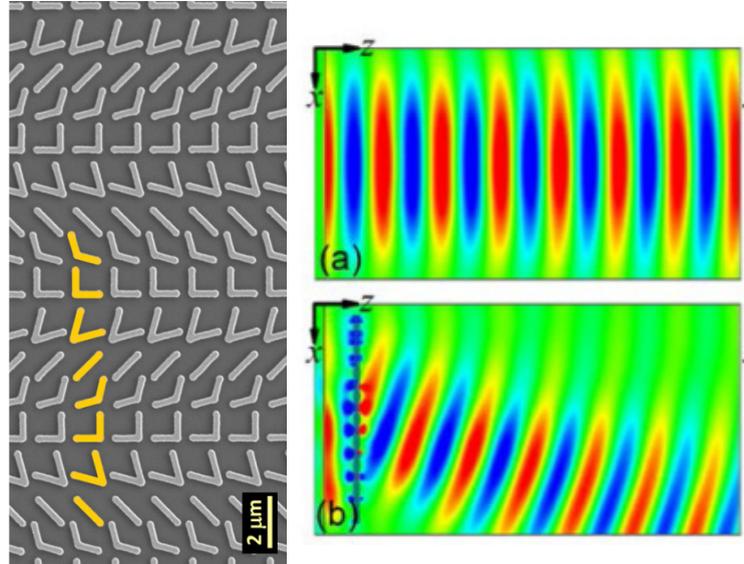


Figura 12: Metasuperficie formada por un arreglo de partículas en forma de L con ángulos variables (izquierda), capaz de separar un haz luminoso en sus componentes con distintas polarizaciones (derecha). (Tomada de la ref. [7]).

superficie podemos manipular la dirección de la luz transmitida o reflejada. Para esto se pueden colocar partículas con un índice de refracción grande sobre una superficie ordinaria y modificar a lo largo de esta su geometría, orientación o densidad, dando lugar a una *metasuperficie*.

Como las resonancias dependen también de la polarización de la luz, este efecto puede usarse para desviar haces de luz de acuerdo a su polarización. En la fig. 12 mostramos una *metasuperficie* formada por partículas en forma de *L* cuya respuesta difiere cuando es iluminada con polarización horizontal o vertical, y que por lo tanto puede separar un haz de luz no polarizada en dos haces con polarizaciones perpendiculares. Otros sistemas pueden separar la luz de acuerdo a su helicidad, en haces con polarización circular derecha o circular izquierda. Mediante otros arreglos se puede variar la fase a lo largo de la dirección radial, de forma de hacer converger rayos que arriben en la dirección normal sobre un punto, su foco, creando así una metalente, como la que ilustra la figura 13.

## 2 Teoría

Las propiedades ópticas de materiales compuestos como los presentados arriba, metamateriales, cristales fotónicos, materiales izquierdos, etc., con propiedades en ocasiones exóticas, están determinadas no sólo por su composición, sino también por su geometría. Propiedades como las relaciones de dispersión de los modos electromagnéticos que se propagan a través de un metamaterial extendido, las amplitudes de reflexión y transmisión, y relaciones de dispersión de modos electromagnéticos confinados a la superficie de sistemas con fronteras, las secciones transversales de dispersión, absorción y extinción de partículas formadas por partículas, pueden ser expresadas en términos del operador dieléctrico macroscópico del compuesto a través

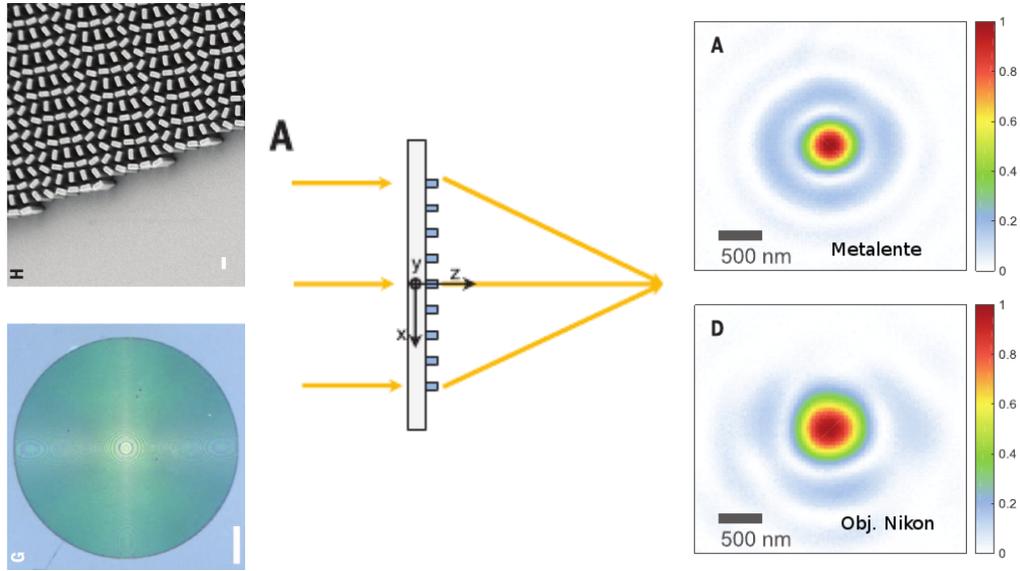


Figura 13: Metalente formada por un arreglo de prismas de alto índice de refracción con orientaciones variables (izquierda). Refracción de la luz debido a la modulación de fase al atravesar el metalente (centro). Imagen de una fuente puntual formada por la metalente y por una lente convencional (derecha). (Tomada de la ref. [8])

de las soluciones de las ecuaciones de Maxwell en dicho material. En esta sección presentaremos un formalismo para obtener la respuesta macroscópica en términos de la respuesta microscópica.

## 2.1 Projectores promedio y fluctuación

Primero notamos que el campo electromagnético dentro de un material inhomogéneo tiene oscilaciones relacionadas con su *textura* y la escala de variación espacial de estas oscilaciones es del orden del tamaño de las partículas que forman el compuesto así como de las distancias entre partículas vecinas. Llamamos campo macroscópico a aquel del cual hemos eliminado dichas fluctuaciones. El campo macroscópico puede tener oscilaciones espaciales, pero éstas están asociadas a las oscilaciones temporales del campo y a la longitud de onda finita de los campos que se propagan. En todo caso, es conveniente introducir dos operadores, el *promedio*  $\hat{\mathcal{P}}_p$  y la *fluctuación*  $\hat{\mathcal{P}}_f$ , tales que al actuar sobre un campo arbitrario  $\mathbf{F}$  producen el campo promedio  $\mathbf{F}_p = \hat{\mathcal{P}}_p \mathbf{F}$  y el campo fluctuante  $\mathbf{F}_f = \hat{\mathcal{P}}_f \mathbf{F}$ . Existen muchas formas de definir promedio. En sistemas desordenados podríamos usar el promedio de ensamble, es decir, sumar sobre  $N$  realizaciones del sistema y dividir entre  $N$ , tomando el límite  $N \rightarrow \infty$ . En sistemas dinámicos como un fluido, y para campos que oscilen lentamente con respecto a los tiempos característicos en que cambia el sistema, podríamos emplear un promedio temporal. Para otro tipo de sistemas podríamos tomar un promedio espacial o aplicar un filtro pasabajo en el espacio recíproco. Lo que debe ser claro es que un campo se promedia cuando se le remueven las fluctuaciones, i.e.,  $\hat{\mathcal{P}}_p = \hat{\mathbf{1}} - \hat{\mathcal{P}}_f$ , con  $\hat{\mathbf{1}}$  el operador identidad. Si pretendiéramos remover las fluctuaciones de un campo que ya hemos promediado, encontraríamos que no queda nada por remover.

Esto implica que el operador promedio es idempotente  $\hat{\mathcal{P}}_p^2 = \hat{\mathcal{P}}_p$ , i.e., el promedio del promedio es el promedio. Análogamente, las fluctuaciones son lo que queda al remover el promedio. Por lo tanto, el operador fluctuación también es idempotente,  $\hat{\mathcal{P}}_f^2 = \hat{\mathcal{P}}_f$ . Finalmente, si eliminamos las fluctuaciones y el promedio, no nos queda nada,  $\hat{\mathcal{P}}_p\hat{\mathcal{P}}_f = 0$ ,  $\hat{\mathcal{P}}_f\hat{\mathcal{P}}_p = 0$ .

Los resultados previos muestran que  $\hat{\mathcal{P}}_p$  y  $\hat{\mathcal{P}}_f$  son proyectores que mandan a un campo al subespacio de los campos promedio y al subespacio de los campos fluctuantes respectivamente, y que el espacio donde vive originalmente el campo vectorial es una suma directa de estos dos subespacios. Esto permite escribir formalmente a un campo arbitrario como si fuera un vector de dos componentes,

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_p \\ \mathbf{F}_f \end{pmatrix}, \quad (9)$$

aunque cada componente en sí no es un número sino un campo vectorial. Análogamente, las funciones respuesta pueden representarse como operadores lineales en términos de matrices de dos por dos. Así, la ecuación  $\mathbf{D} = \hat{\epsilon}\mathbf{E}$  puede escribirse como una ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_p \\ \mathbf{D}_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{pp} & \hat{\epsilon}_{pf} \\ \hat{\epsilon}_{fp} & \hat{\epsilon}_{ff} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_p \\ \mathbf{E}_f \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Aquí, hemos definido  $\hat{\mathbf{O}}_{\alpha\beta} = \hat{\mathcal{P}}_\alpha\hat{\mathbf{O}}\hat{\mathcal{P}}_\beta$  ( $\alpha, \beta = p, f$ ) para cualquier operador  $\hat{\mathbf{O}}$ . Interpretaremos a la ec. (10) como un ecuación material *microscópica*, pues incorpora las fluctuaciones espaciales derivadas de la textura del material. La correspondiente ecuación macroscópica sería

$$\mathbf{D}_M = \hat{\epsilon}_M\mathbf{E}_M, \quad (11)$$

donde identificamos a los campos macroscópicos como los campos promediados y por lo tanto, libres de fluctuaciones,  $\mathbf{D}_M \equiv \mathbf{D}_p$ ,  $\mathbf{E}_M \equiv \mathbf{E}_p$ . En general,  $\hat{\epsilon}_M$  no es el promedio  $\hat{\epsilon}_{pp}$  de  $\hat{\epsilon}$ , pues puede haber *correlaciones* entre las fluctuaciones espaciales de  $\epsilon(\mathbf{r})$  y del campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ .

## 2.2 Proyectores longitudinal y transversal

Por otro lado, recordemos que de acuerdo al teorema de Helmholtz, todo campo vectorial  $\mathbf{F} = \mathbf{F}^L + \mathbf{F}^T$  puede escribirse como la suma de dos contribuciones, un campo longitudinal  $\mathbf{F}^L = \hat{\mathcal{P}}^L\mathbf{F}$  y un campo transversal  $\mathbf{F}^T = \hat{\mathcal{P}}^T\mathbf{F}$ , que cumplen las ecuaciones

$$\nabla \times \mathbf{F}^L = 0, \quad (12a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{F}^L = \nabla \cdot \mathbf{F}, \quad (12b)$$

$$\nabla \times \mathbf{F}^T = \nabla \times \mathbf{F}, \quad (12c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{F}^T = 0. \quad (12d)$$

Para obtener los proyectores  $\hat{\mathcal{P}}^L$  y  $\hat{\mathcal{P}}^T$  podemos empezar con la ec. (12a), la cual implica que  $\mathbf{F}^L$  puede derivarse de algún potencial escalar  $\Phi$  como  $\mathbf{F}^L = -\nabla\Phi$ . Luego, la ecuación (12b) implica que el potencial obedece la ec. de Poisson,  $\nabla^2\Phi =$

$-\nabla \cdot \mathbf{F}$ , cuya solución formal es  $\Phi = -\hat{\nabla}^{-2}\hat{\nabla} \cdot \mathbf{F}$ . Aquí,  $\hat{\nabla}^{-2}$  representa el operador inverso al laplaciano, el cual puede escribirse en el espacio real como un operador integral cuyo kernel en 3D es el potencial coulombiano  $-1/(4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ . Finalmente, obtenemos  $\mathbf{F}^L = \hat{\nabla}\hat{\nabla}^{-2}\hat{\nabla} \cdot \mathbf{F}$  de donde identificamos al proyector longitudinal

$$\hat{\mathcal{P}}^L = \hat{\nabla}\hat{\nabla}^{-2}\hat{\nabla} . \quad (13)$$

Análogamente, podemos identificar al proyector transversal

$$\hat{\mathcal{P}}^T = \hat{\mathbf{1}} - \hat{\mathcal{P}}^L = -\hat{\nabla} \times \hat{\nabla}^{-2}\hat{\nabla} \times . \quad (14)$$

### 2.3 Caso no retardado

Para obtener la respuesta macroscópica  $\hat{\epsilon}_M$ , que como hemos mencionado no es el simple promedio de la respuesta microscópica  $\hat{\epsilon}$ , recurrimos a las ecuaciones de Maxwell. Consideremos un material formado por inclusiones muy pequeñas y muy cercanas entre sí, cuyo tamaño y separación sean mucho menores que la longitud de onda característica de la luz  $\lambda_0 = 2\pi c/\omega$  a una frecuencia  $\omega$  dada. En este caso podemos ignorar el *retardamiento*, tomar el límite  $c \rightarrow \infty$  en la ecuación de Faraday y tratar al campo eléctrico como si fuera un campo puramente *longitudinal*,  $\mathbf{E} = \mathbf{E}^L$ , derivable de un potencial escalar. Por tanto, la proyección longitudinal del desplazamiento,  $\mathbf{D}^L = \hat{\mathcal{P}}^L\hat{\epsilon}\mathbf{E} = \hat{\mathcal{P}}^L\hat{\epsilon}\mathbf{E}^L = \hat{\mathcal{P}}^L\hat{\epsilon}\hat{\mathcal{P}}^L\mathbf{E}^L$ ,

$$\mathbf{D}^L = \hat{\epsilon}^{LL}\mathbf{E}^L, \quad (15)$$

cumple las mismas ecuaciones que el campo eléctrico longitudinal externo,

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{D}^L &= 0 = \nabla \times \mathbf{E}_{\text{ex}}^L, \\ \nabla \cdot \mathbf{D}^L &= 4\pi\rho^{\text{ex}} = \nabla \cdot \mathbf{E}_{\text{ex}}^L. \end{aligned} \quad (16)$$

Aquí, hemos definido  $\hat{\mathcal{O}}^{\alpha\beta} = \hat{\mathcal{P}}^\alpha\hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{P}}^\beta$  ( $\alpha, \beta = L, T$ ) para cualquier operador  $\hat{\mathcal{O}}$ . Entonces, podemos identificar a  $\mathbf{D}^L$  con el campo eléctrico longitudinal externo. Siendo un campo externo, sus fuentes son únicamente las cargas externas  $\rho^{\text{ex}}$ , las cuales no tienen absolutamente nada que ver con la composición del material ni con la disposición de sus componentes. En particular,  $\mathbf{D}^L$  no tiene fluctuaciones espaciales derivadas de la textura del material,  $\mathbf{D}^L = \mathbf{D}_p^L = \hat{\mathcal{P}}_p\mathbf{D}^L$ . Despejando el campo eléctrico de la ec. (15) obtenemos

$$\mathbf{E}^L = (\hat{\epsilon}^{LL})^{-1}\mathbf{D}^L, \quad (17)$$

y promediando ambos lados de la ecuación, usando el hecho de que  $\mathbf{D}^L$  no tiene fluctuaciones y que  $\hat{\mathcal{P}}_p$  es idempotente, obtenemos

$$\mathbf{E}_p^L = (\hat{\epsilon}^{LL})_{pp}^{-1}\mathbf{D}_p^L. \quad (18)$$

Finalmente, identificando los campos promedios con los campos macroscópicos y su relación con la respuesta macroscópica, podemos identificar[9]

$$(\hat{\epsilon}_M^{LL})^{-1} = (\hat{\epsilon}^{LL})_{pp}^{-1}. \quad (19)$$

Podemos leer este resultado de la siguiente manera: el inverso de la proyección longitudinal de la respuesta dieléctrica macroscópica es igual al promedio del inverso de la proyección longitudinal de la respuesta microscópica.[10]

## 2.4 Caso retardado

Como hemos mostrado, para obtener la respuesta macroscópica de un sistema no basta con promediar cualquier función respuesta. Por ejemplo, el promedio de  $\epsilon$  no tiene significado como respuesta macroscópica. Sin embargo, si logramos encontrar un operador que responda a una excitación *externa*, la cual no tiene fluctuaciones espaciales asociadas a la textura microscópica del material, su promedio nos proporciona la respuesta correspondiente macroscópica. Para dar un ejemplo de éste proceso, a continuación obtendremos la respuesta macroscópica en el caso en que no podemos ignorar el retardamiento. Tomando el rotacional de la ley de Faraday y sustituyendo la ec. de Ampère-Maxwell podemos obtener una ecuación de onda con fuentes, que podemos escribir como

$$\hat{\mathcal{W}}\mathbf{E} = \frac{4\pi}{i\omega}\mathbf{j}^{\text{ex}}, \quad (20)$$

donde

$$\hat{\mathcal{W}} = \hat{\epsilon} + \frac{c^2}{\omega^2}\nabla^2\hat{\mathcal{P}}^T \quad (21)$$

es una generalización del *operador de onda*. Podemos resolver la ec. (20) formalmente para obtener el campo en el material

$$\mathbf{E} = \frac{4\pi}{i\omega}\hat{\mathcal{W}}^{-1}\mathbf{j}^{\text{ex}}, \quad (22)$$

e interpretar al inverso del operador de onda  $\hat{\mathcal{W}}^{-1}$  como una respuesta a la excitación externa  $\mathbf{j}^{\text{ex}}$ , y a su promedio como la respuesta macroscópica a la corriente externa,

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} = \hat{\mathcal{W}}_{pp}^{-1}. \quad (23)$$

Interpretando al operador de onda macroscópico en términos de la permitividad macroscópica

$$\hat{\mathcal{W}}_M = \hat{\epsilon}_M + \frac{c^2}{\omega^2}\nabla^2\hat{\mathcal{P}}^T \quad (24)$$

podemos despejarla tras invertir la ecuación (23). Formalmente, podemos obtener la permitividad macroscópica a partir de la permitividad microscópica siguiendo los pasos indicados en la figura 14. A partir de la respuesta dieléctrica de las componentes de nuestro material podemos construir el operador de onda, lo invertimos, lo promediamos, lo identificamos en términos del operador de onda macroscópico, lo volvemos a invertir y finalmente obtenemos la respuesta dieléctrica macroscópica.[\[11\]](#)

## 2.5 Sistema binario periódico sin retardamiento

Consideremos ahora un sistema periódico hecho de dos materiales, digamos, de partículas de un material  $B$  embebidas en una matriz de un material  $A$ . La respuesta dieléctrica *microscópica* es en este caso

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \begin{cases} \epsilon_A & \text{si } \mathbf{r} \in A \\ \epsilon_B & \text{si } \mathbf{r} \in B \end{cases} \quad (25)$$

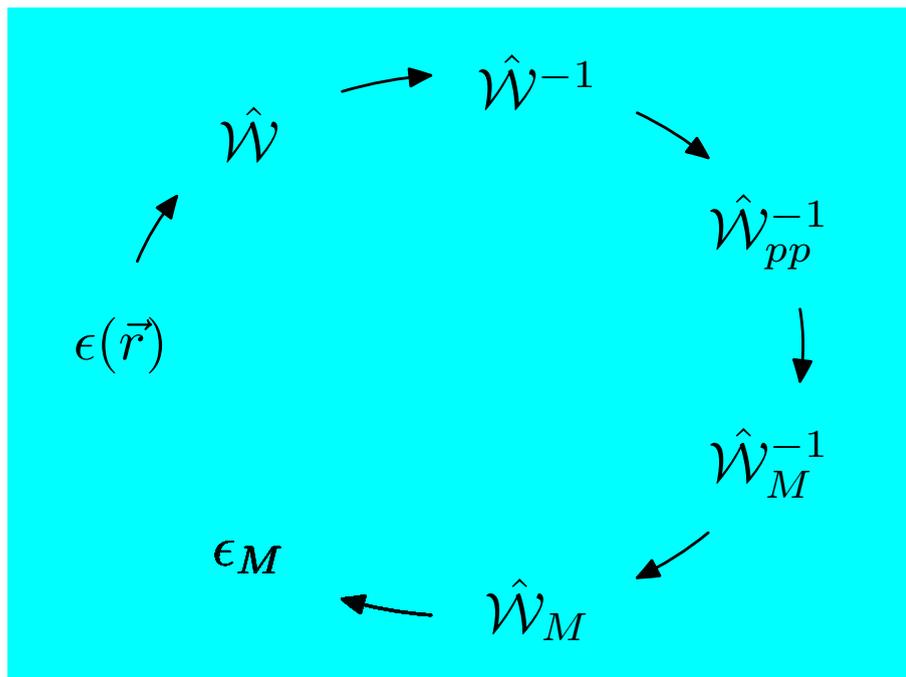


Figura 14: Pasos para obtener la respuesta macroscópica  $\hat{\epsilon}_M$  a partir de la respuesta microscópica  $\epsilon(\mathbf{r})$  incluyendo efectos de retardamiento. Primero construimos el operador de onda, lo invertimos, lo promediamos, identificamos el operador de onda macroscópico inverso, lo invertimos y finalmente identificamos el operador dieléctrico macroscópico.

la cual puede escribirse como

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_A}{u}(u - B(\mathbf{r})), \quad (26)$$

donde

$$u \equiv \frac{1}{1 - \epsilon_B/\epsilon_A} \quad (27)$$

se conoce como la *variable espectral*, y

$$B(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \text{si } \mathbf{r} \in A \\ 1, & \text{si } \mathbf{r} \in B \end{cases} \quad (28)$$

es la *función característica*. Notemos que  $u$  depende de la composición del material y puede depender de la frecuencia a través de las funciones dieléctricas de las componentes, mientras que  $B(\mathbf{r})$  no depende de la composición ni de la frecuencia, sino únicamente de la geometría.

Supongamos que nuestro sistema es periódico, caracterizado por una *red de Bravais*  $\{\mathbf{R}\}$ , tal que  $\epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \epsilon(\mathbf{r})$ . A esta red le corresponde una *red recíproca*  $\{\mathbf{K}\}$ , formada por todos aquellos vectores de onda tales que el producto escalar  $\mathbf{K} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n$ , con  $n$  un número entero para cualquier vector real  $\mathbf{R}$  y vector recíproco  $\mathbf{K}$ .

Entonces, podemos describir a  $\hat{\epsilon}$  como una matriz en el espacio recíproco mediante una integral de Fourier,

$$\epsilon_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} = \epsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{K}'} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r \epsilon(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (29)$$

donde la integral se realiza sobre una celda primitiva cualquiera, cuyo volumen es  $\Omega$ . La relación inversa es

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \epsilon_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (30)$$

El teorema de Bloch nos permite escribir a los campos en el interior de un sistema periódico como una superposición de ondas de Bloch, cada una de las cuales cambia por una fase  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$  cuando nos desplazamos un vector de la red, donde  $\mathbf{k}$  es el *vector de Bloch*, una especie de vector de onda, que es una *cantidad conservada*. Por tanto, eligiendo un valor cualquiera de  $\mathbf{k}$  podemos escribir cualquier campo en términos de una suma de Fourier como

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{F}_{\mathbf{K}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}. \quad (31)$$

El *teorema de convolución* nos permite entonces escribir la ecuación material  $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r})$  en el espacio recíproco como la ecuación matricial

$$\mathbf{D}_{\mathbf{K}} = \sum_{\mathbf{K}'} \epsilon_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} \mathbf{E}_{\mathbf{K}'}. \quad (32)$$

Como la respuesta del material puede representarse en distintos espacios, como son el espacio real o el espacio recíproco, conviene abstraer la acción de la respuesta

dieléctrica y tratarla como un operador  $\hat{\epsilon}$  abstracto, más que como una función de la posición.

En el espacio recíproco, el operador  $\nabla$  se puede representar por un producto con el vector  $\nabla \rightarrow i(\mathbf{k} + \mathbf{K})$ , por lo cual el laplaciano es  $\nabla^2 \rightarrow -|\mathbf{k} + \mathbf{K}|^2$  y su inverso es simplemente  $\nabla^{-2} \rightarrow -1/|\mathbf{k} + \mathbf{K}|^2$ . Por lo tanto, el proyector longitudinal (13) se puede representar por la matriz

$$\mathcal{P}_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}^L = \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} \hat{\mathbf{K}} \hat{\mathbf{K}}', \quad (33)$$

donde definimos los vectores unitarios

$$\hat{\mathbf{K}} \equiv \frac{\mathbf{k} + \mathbf{K}}{|\mathbf{k} + \mathbf{K}|}, \quad (34)$$

y  $\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}$  es una función delta de Kronecker.

Los vectores recíprocos  $\mathbf{K} \neq 0$  corresponden a oscilaciones con longitudes de onda del orden de el parámetro de red del sistema periódico. Es conveniente entonces *definir* el promedio como un filtro pasabajos en el espacio recíproco que elimina todos los vectores recíprocos, exceptuando  $\mathbf{K} = 0$ , convirtiendo una onda de Bloch en una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}$ . Escribimos entonces

$$\mathcal{P}_{p,\mathbf{K}\mathbf{K}'} = \delta_{\mathbf{K}0} \delta_{\mathbf{K}'0}. \quad (35)$$

De acuerdo a la ec. (19), podemos hallar la respuesta macroscópica siguiendo los siguientes pasos:

1. Expresamos la permitividad como una matriz  $\epsilon_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}$  en el espacio recíproco haciendo una transformación de Fourier (ec. (29)).
2. Tomamos su proyección longitudinal,  $\epsilon_{\mathbf{K}\mathbf{k}}^{LL}$ , multiplicando a izquierda y derecha por el proyector longitudinal (ec. (33)).
3. Invertimos la matriz resultante en el subespacio de campos vectoriales longitudinales  $(\epsilon_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}^{LL})^{-1}$ .
4. Promediamos la inversa tomando el elemento  $\mathbf{K} = \mathbf{K}' = 0$ .
5. Interpretamos el resultado como el inverso de la proyección longitudinal del tensor dieléctrico macroscópico.

El procedimiento anterior puede resumirse como  $\epsilon_M^{LL} = \hat{\mathbf{k}} \epsilon_M^{LL} \hat{\mathbf{k}}$ , donde la *componente longitudinal* de la respuesta es

$$\epsilon_M^{LL} = \hat{\mathbf{k}} \cdot \epsilon_M \cdot \hat{\mathbf{k}} = \left( \left( \hat{\mathbf{K}} \cdot \epsilon_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} \hat{\mathbf{K}}' \right)^{-1} \Big|_{\mathbf{K}=\mathbf{K}'=0} \right)^{-1}. \quad (36)$$

Repetiendo el cálculo indicado por la ec. (36) para distintas direcciones  $\hat{\mathbf{k}}$  del vector de onda, podemos hallar todas las componentes del tensor dieléctrico macroscópico  $\epsilon_M$ .

## 2.6 Recursión de Haydock

De acuerdo a la sección anterior, para obtener la respuesta macroscópica de un medio binario arbitrario en el límite de longitud de onda larga, basta invertir la matriz  $\hat{\mathbf{K}} \cdot \epsilon_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} \hat{\mathbf{K}}'$  y tomar el elemento  $\mathbf{00}$  del resultado. Sustituyendo la ec. (26), obtenemos

$$\frac{1}{\epsilon_M^{LL}} = \frac{u}{\epsilon_A} (u\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} - B_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}^{LL})^{-1} \Big|_{\mathbf{K}=\mathbf{K}'=0}, \quad (37)$$

donde introdujimos la componente longitudinal de la función característica en el espacio recíproco

$$B_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}^{LL} = \hat{\mathbf{K}} \cdot B_{\mathbf{K}-\mathbf{K}'} \hat{\mathbf{K}}', \quad (38)$$

y  $B_{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}$  es el coeficiente de Fourier de la función característica  $B(\mathbf{r})$  correspondiente al vector recíproco  $\mathbf{K} - \mathbf{K}'$ .

Notamos que en la ec. (37) debemos calcular el inverso de un operador  $(u - \hat{B}^{LL})$  representado como una matriz en el espacio recíproco, donde  $u$  es un número complejo y  $\hat{B}^{LL}$  es un operador hermitiano, y luego proyectar el resultado sobre un estado  $|0\rangle$  correspondiente a una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}$ . Esto es análogo al cálculo del operador de Green proyectado  $\langle 0 | \hat{\mathcal{G}}(\varepsilon) | 0 \rangle$  en mecánica cuántica, donde  $\hat{\mathcal{G}}(\varepsilon) = (\varepsilon - \hat{\mathcal{H}})^{-1}$  es el operador de Green correspondiente a un operador hamiltoniano  $\mathcal{H}$  evaluado para un valor  $\varepsilon$  de una energía compleja. Entre las aplicaciones del operador de Green proyectado se encuentra el cálculo de la densidad de estados cuánticos proyectada. Podemos entonces tomar prestado el método recursivo de Haydock [12] para calcular proyecciones de funciones de Green. De acuerdo a nuestra analogía,  $u$  juega el papel de energía compleja  $\varepsilon$  y  $\hat{B}^{LL}$  juega el papel de hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}$ .

Hemos definido el estado  $|0\rangle$  como el correspondiente a una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}$ , i.e., un estado cuya representación en el espacio recíproco es  $\langle \mathbf{K} | 0 \rangle = \delta_{\mathbf{K}\mathbf{0}}$ , pues no tiene contribuciones de ondas con  $\mathbf{K} \neq 0$ . Ahora, podemos generar un nuevo estado haciendo actuar a nuestro hamiltoniano sobre el estado inicial,  $|\tilde{1}\rangle = \hat{\mathcal{H}} |0\rangle$ . Escribimos este estado como una combinación lineal del estado que ya teníamos  $|0\rangle$  y un estado nuevo  $|1\rangle$  del cual pedimos que sea ortogonal a  $|0\rangle$  y que esté normalizado,  $|\tilde{1}\rangle = b_1 |1\rangle + a_0 |0\rangle$ . Ahora repetimos el procedimiento con el estado  $|1\rangle$ , i.e.,  $|\tilde{2}\rangle = \hat{\mathcal{H}} |1\rangle = b_2 |2\rangle + a_1 |1\rangle + b_1 |0\rangle$ . El caso genérico sería

$$|\tilde{n}\rangle = \hat{\mathcal{H}} |n-1\rangle = b_n |n\rangle + a_{n-1} |n-1\rangle + b_{n-1} |n-2\rangle, \quad (39)$$

donde exigimos que todos los estados sean ortonormales, es decir,

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}. \quad (40)$$

Aquí empleamos el producto escalar

$$\langle n | m \rangle = \sum_{\mathbf{K}} \phi_n^*(\mathbf{K}) \phi_m(\mathbf{K}) = \frac{1}{\Omega} \int_0 d^3r \phi_n^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}) \quad (41)$$

donde, copiando el lenguaje de la mecánica cuántica,  $\phi_m(\mathbf{K}) = \langle \mathbf{K} | n \rangle$  es la *función de onda* correspondiente al estado  $|n\rangle$  evaluada en el vector recíproco  $\mathbf{K}$ , y  $\phi_m(\mathbf{r}) =$

$\langle \mathbf{r}|n\rangle$  es la función de onda correspondiente al mismo estado pero evaluada en la posición  $\mathbf{r}$ , y donde hemos empleado la identidad de Parseval.

Notamos que en la ec. (39) no aparecen los términos  $|n-3\rangle$ ,  $|n-4\rangle$ , etc. pues nuestro operador es hermitiano. Por ejemplo, i.e.,  $\langle n-3|\tilde{n}\rangle = \langle n-3|H|n-1\rangle = \langle n-1|H|n-3\rangle^* = (\langle n-1|(b_{n-2}|n-2\rangle + a_{n-3}|n-3\rangle + b_{n-3}|n-4\rangle))^* = 0$ . Los coeficientes de Haydock son reales y pueden obtenerse de la condición de ortonormalidad,

$$a_{n-1} = \langle n-1|\hat{\mathcal{H}}|n-1\rangle \quad (42)$$

y

$$|n\rangle = (|\tilde{n}\rangle - a_{n-1}|n-1\rangle - b_{n-1}|n-1\rangle)/b_n, \quad \langle n|n\rangle = 1. \quad (43)$$

De esta manera podemos construir una *base*  $\{|n\rangle\}$  en la cual el *hamiltoniano*  $\hat{\mathcal{H}}$  puede representarse por una matriz tridiagonal

$$\mathcal{H}_{nn'} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & 0 \dots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & 0 \dots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & 0 \dots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & b_4 \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \ddots \end{pmatrix} \quad (44)$$

De acuerdo a la ec. (37), la respuesta macroscópica está dada por la proyección de la inversa  $\mathcal{G}_{nn'}$  de la matriz tridiagonal  $\varepsilon - \mathcal{H}_{nn'}$  sobre el estado  $|0\rangle$ , i.e., no necesitamos toda la inversa, sino sólo su elemento  $\mathcal{G}_{00}$ . Notamos que el vector columna  $\mathcal{G}_{n0}$  obedece la ecuación

$$\sum_m (\varepsilon \delta_{nm} - \mathcal{H}_{nm}) \mathcal{G}_{m0} = \delta_{n0}. \quad (45)$$

Si truncamos la ecuación después de  $N$  renglones, el último renglón de esta ecuación sería de la forma

$$-b_N \mathcal{G}_{N-1,0} + (u - a_N) \mathcal{G}_{N,0} = 0, \quad (46)$$

lo cual nos permite despejar

$$\mathcal{G}_{N,0} = \frac{b_N}{u - a_N} \mathcal{G}_{N-1,0}. \quad (47)$$

Sustituyendo esta solución en la penúltima ecuación

$$\begin{aligned} & -b_{N-1} \mathcal{G}_{N-2,0} + (u - a_{N-1}) \mathcal{G}_{N-1,0} - b_N \mathcal{G}_{N,0} \\ & = -b_{N-1} \mathcal{G}_{N-2,0} + \left( u - a_{N-1} - \frac{b_N^2}{u - a_N} \right) \mathcal{G}_{N-1,0} = 0, \end{aligned} \quad (48)$$

podemos despejar

$$\mathcal{G}_{N-1,0} = \frac{b_{N-1}}{u - a_{N-1} - \frac{b_N^2}{u - a_N}} \mathcal{G}_{N-2,0}. \quad (49)$$

Prosiguiendo de esta forma con todas las ecuaciones correspondientes a  $n > 0$ ,

$$-b_n \mathcal{G}_{n-1,0} + (u - a_n) \mathcal{G}_{n,0} - b_{n+1} \mathcal{G}_{n+1,0} = 0, \quad (50)$$

llegamos a

$$\mathcal{G}_{1,0} = \frac{b_1}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{u - a_3 - \ddots}}} \mathcal{G}_{0,0}. \quad (51)$$

Sustituyendo en la ecuación correspondiente a  $n = 0$ ,

$$(u - a_0)\mathcal{G}_{00} - b_{n+1}\mathcal{G}_{1,0} = 1, \quad (52)$$

obtenemos una expresión para  $\mathcal{G}_{00}$  en forma de una fracción continuada

$$\mathcal{G}_{00} = \frac{1}{u - a_0 - \frac{b_1^2}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{u - a_3 - \ddots}}}}, \quad (53)$$

la cual podemos emplear en la ec. (37) para finalmente obtener la respuesta macroscópica

$$\epsilon_M^{LL} = \frac{\epsilon_A}{u} \left( u - a_0 - \frac{b_1^2}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{u - a_3 - \ddots}}} \right). \quad (54)$$

Debemos enfatizar que en esta expresión, los coeficientes de Haydock  $\{a_n, b_n\}$  dependen exclusivamente de la geometría a través de la función característica  $B(r)$  y no de la composición del material ni de la frecuencia. Por lo tanto, sólo es necesario calcularlos una vez para una geometría dada y posteriormente pueden emplearse para calcular la respuesta de cualquier metamaterial con dicha geometría con cualquier composición y a cualquier frecuencia, simplemente sustituyendo la variable espectral adecuada  $u$  (ec. (27)). Así, con este formalismo podemos calcular la respuesta de sistemas formados por aislantes o metales, con o sin dispersión y con o sin disipación; el operador  $\hat{B}^{LL}$  es hermitiano haya o no haya dispersión o disipación.

Por otro lado, podemos aplicar el hamiltoniano  $\hat{B}^{LL}$  (38) en etapas, notando que multiplicar por  $\hat{\mathbf{K}}'$  es trivial en el espacio recíproco. El producto matricial del vector resultante con  $B_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} = B_{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}$  corresponde a una convolución, por lo cual, tras una transformada de Fourier hacia el espacio real, se convierte en un producto trivial por la función característica  $B(\mathbf{r})$ . Finalmente, tomando una transformada de Fourier de regreso al espacio recíproco, el producto escalar por los vectores unitarios  $\hat{\mathbf{K}}$  se vuelve trivial. Esto muestra que podemos aplicar nuestro hamiltoniano repetidas veces para obtener los coeficientes de Haydock sin necesidad de multiplicar ninguna matriz. Eso vuelve muy eficiente el proceso aquí descrito.

### 3 Implementación

La teoría mostrada arriba ha sido implementada en un paquete computacional llamado *Photonic*, el cual ha sido colocado en el *dominio público* [13, 14]. El programa está escrito en el lenguaje *PERL*, el cual es muy expresivo y cuya sintaxis hereda

construcciones de lenguajes previos como *C*, *C++*, *awk*, *bash*, *sed*, etc. El lenguaje es versátil y flexible, y refleja la filosofía de su creador resumida en frases como *hay más de una manera de resolverlo y lo fácil debe ser fácil, lo difícil debe ser posible*. Sólo contiene tres tipos de datos, que son *escalares*, *arreglos* indexados por un entero y *arreglos asociativos* indexados por cualquier escalar. Los escalares pueden representar números enteros o reales, cadenas de caracteres, o referencias a otros escalares, arreglos o arreglos asociativos, e incluso, referencias a subrutinas. Los arreglos son dinámicos y pueden crecer o decrecer en ambos extremos o en su interior. Esto permite implementar de manera trivial pilas de datos (*stacks*), colas *fifo*, árboles y otras estructuras de datos. Se pueden construir fragmentos de código durante la ejecución de un programa para ejecutarse posteriormente. Esta flexibilidad permite emplear una gran variedad de paradigmas al programar en *PERL*, incluyendo programación procedural, funcional y/o orientada a objetos.

El costo a pagar por la flexibilidad del lenguaje es la velocidad de ejecución. Se ha reportado recientemente que *PERL* es varias decenas de veces más lento que *C* para tareas orientadas a procesamiento numérico.[15] Por ello, un grupo de investigadores se abocaron a crear una extensión del lenguaje llamado *Perl Data Language* o *PDL* [16, 17, 18], que permite ligar rutinas numéricas escritas en otros lenguajes como *C* o *Fortran* para el manejo eficiente de arreglos numéricos, sin sacrificar la flexibilidad y expresividad de *PERL*. Una prueba reciente[15] mostró que *PDL* es competitivo y hasta puede superar en velocidad a códigos nativos en *C*.

Finalmente, para simplificar el proceso de codificación y volverlo robusto conforme evoluciona el paquete se empleó un sistema de programación de objetos conocido como *Moose*[19]. Este sistema permite definir *clases* que abstraen el comportamiento de los *objetos*, instancias que tienen una serie de *atributos*, datos privados, y *métodos* que definen su comportamiento. Las clases pueden heredar su comportamiento de otras clases o de *roles* que definen las interfases. Contar con una librería de clases permite armar programas que resuelven problemas complejos juntando bloques que ensamblan unos con otros, como las construcciones con bloques de juguetes *Lego*.

### 3.1 Ejemplo

No explicaremos aquí los detalles de la implementación, pues su comprensión requeriría cierto dominio de los sistemas (Perl, PDL y Moose) empleados. En cambio, mostraremos fragmentos de un pequeño programa para explicar cómo se usa el sistema. El programa íntegro, disponible en la referencia [20], calcula el tensor dieléctrico de una red tetragonal de toroides hechos de cierto material y embebido en una matriz de otro material.

Iniciamos con una serie de *pragmas* y cargando paquetes que serán útiles más adelante

```
#!/usr/bin/env perl
# ...
use strict;
use warnings;
use v5.12;
use Getopt::Long;
```

```

use PDL;
use PDL::NiceSlice;
use PDL::Constants qw(PI);
use Photonic::Geometry::FromB;
use Photonic::LE::NR2::Haydock;
use Photonic::LE::NR2::EpsL;

```

`strict` y `warnings` son para pedir al sistema que sea estricto y nos advierta de errores potenciales, `v5.12` es para habilitar algunas construcciones semánticas, `Getopt` es para leer los parámetros desde la línea de comandos al ejecutar el programa, `PDL` es para usar la interface numérica, `NiceSlice` para simplificar el manejo de índices en las estructuras de datos y `PI` es simplemente una constante útil. Los paquetes relacionados con `Photonic` serán discutidos más abajo. Las componentes `LE` y `NR2` en su nombre indican que usaremos aquellas rutinas relacionadas con la respuesta dieléctrica longitudinal en el límite no retardado y restringido a dos componentes.

A continuación definimos algunos parámetros y el código para leerlos desde la línea de comandos.

```

my $ratio; # b/a for torus
...
my $options=q(
'ratio=f'=>\$ratio,
...
);
...
GetOptions( %options)or usage($options, "Bad options");
usage($options, "Missing options")
    unless !all {defined $_}
        ($ratio, $fraction, @eps_a, @eps_b, $Nxy, $Nz, $Nh);
...
set_autopthread_targ($cores) if defined $cores;;

```

Los parámetros a leer son la razón de los radios del toroide, la fracción de llenado en la celda unitaria, el numero de *voxels* a lo largo de los ejes de la red, los pares de funciones dieléctricas e emplear para los toroides y la matriz, el número de coeficientes de Haydock a emplear y el número de núcleos computacionales a emplear en el cálculo. A continuación se leen y validan las opciones y de ser necesario se envían mensajes de error. La rutina `set_autopthread_targ` establece el número de núcleos computacionales que deseamos usar al paralelizar el programa.

Como indicamos arriba, la geometría queda definida a partir de la función característica, cuyo valor es 1 dentro del toroide y 0 en su exterior. Primero calculamos los dos radios del toroide en términos de la fracción de llenado deseada.

```

my ($Nxy2, $Nz2)=(2*$Nxy+1, 2*$Nz+1);
my $unit_cell_volume=$Nxy2*$Nxy2*$Nz2;
my $small_radius=($fraction*$unit_cell_volume/(2*PI**2*$ratio))**(1/3);
my $large_radius=$ratio*$small_radius;
warn "Tori overlap" if $small_radius>$Nz
                    or $large_radius+$small_radius>$Nxy;

```

Luego creamos un arreglo 3D representando a la celda unitaria y lo poblamos de unos y ceros de acuerdo a la función característica deseada.

```
my $r=zeros($Nxy2, $Nxy2, $Nz2)->ndcoords
    -pdl($Nxy, $Nxy, $Nz); #positions array
my $B=(sqrt($r((0))**2+$r((1))**2)-$large_radius)**2
    +$r((2))**2 < $small_radius**2;
```

La rutina `zeros` produce el arreglo 3D de ceros con el número de dimensiones y el tamaño solicitado, el *método* `ndcoords` asigna a cada punto del arreglo un vector en 3D con las coordenadas de dicho punto. Al restar las coordenadas del centro del arreglo, asignamos a la variable `$r` las coordenadas de los puntos del arreglo con respecto al centro. Procesando dichas coordenadas obtenemos la distancia de cada punto al círculo alrededor del cual se forma el toroide y en la variable `$B` guardamos un 1 o un 0 dependiendo de si estamos suficientemente cerca de la generatriz o no.

A continuación inicializamos dos objetos que codifican la geometría del sistema empleando la función característica.

```
my $gx=Photonic::Geometry::FromB->new(B=>$B, Direction0=>pdl(1,0,0));
my $gz=Photonic::Geometry::FromB->new(B=>$B, Direction0=>pdl(0,0,1));
```

Las clases `Geometry` saben cómo calcular la red de *voxels*, pero también cómo calcular la red recíproca, y los vectores recíprocos normalizados  $\hat{K}$ , entre otros métodos relacionados a la geometría del sistema, a partir del atributo `B` que inicializamos con la función característica `$B`. Sin embargo, para ello necesita saber en qué dirección apunta el vector de Bloch, asociado al atributo `Direction0`. Emplearemos entonces dos *geometrías*, una con ondas viajando en la dirección  $\hat{x}$  y otra viajando en la dirección  $\hat{z}$ , i.e., a lo largo del plano y del eje del toroide, respectivamente.

Con las dos geometrías podemos inicializar dos objetos para calcular coeficientes de Haydock.

```
my $nrx=Photonic::LE::NR2::Haydock->new(geometry=>$gx, nh=>$Nh);
my $nrz=Photonic::LE::NR2::Haydock->new(geometry=>$gz, nh=>$Nh);
```

Finalmente, para cada pareja de funciones dieléctricas, calculamos la respuesta dieléctrica macroscópica longitudinal, proyectada sobre la dirección del vector de Bloch establecida arriba.

```
say "#ratio Nxy Nz Nh f-nom f-act medium torus epsxx epszz";
foreach(0..@eps_a-1){
    my ($ea, $eb)=(pdl($eps_a[$_])->r2C, pdl($eps_b[$_])->r2C);
    my $epsx_calc=Photonic::LE::NR2::EpsL->new(haydock=>$nrx, nh=>$Nh,
        epsA=>$ea, epsB=>$eb);
    my $epsz_calc=Photonic::LE::NR2::EpsL->new(haydock=>$nrz, nh=>$Nh,
        epsA=>$ea, epsB=>$eb);
    my $resultx=$epsx_calc->epsL;
    my $resultz=$epsz_calc->epsL;
```

El objeto `EpsL` sabe calcular la respuesta dieléctrica longitudinal y se inicializa con un objeto que calcula coeficientes de Haydock, con el número de coeficientes que se desea usar y con las funciones dieléctricas de ambas componentes. Finalmente, el método `epsL` regresa el *valor* de la función dieléctrica macroscópica deseada.

El resto del programa simplemente imprime el resultado y mensajes de error de ser necesario.

```

say sprintf "%.4f %d %d %d %.4f %.4f %.4f %.4f %.4f %.4f",
$ratio, $Nxy, $Nz, $Nh, $fraction, $gx->f, $ea->re, $eb->re,
$resultx->re, $resultz->re;
say "x-no-covergió" unless $epsx_calc->converged;
say "z-no-covergió" unless $epsz_calc->converged;
}

sub usage {
    ...
}

```

Podemos correr el programa como en el siguiente ejemplo, en el que calculamos las propiedades de una red tetragonal de  $161 \times 161 \times 41$  voxeles con toroides cuyas funciones dieléctricas son  $\epsilon_b = 5, 10$ , inmersos en el vacío,  $\epsilon_a = 1$ , con una fracción de llenado nominal  $f = 0.3$ , con una razón entre los radios del círculo mayor al círculo menor  $R_>/R_< = 3$  y empleando 100 coeficientes de Haydock, usando en el cálculo 4 núcleos de la unidad de procesamiento,

```

./toroid.pl -ratio 3 -fraction .3 -Nz 20 -Nxy 80 \
    -eps_a 1 -eps_b 5 -eps_a 1 -eps_b 10 -Nh 100 -cores 4

```

obteniendo unos segundos después la siguiente tabla:

| #ratio | Nxy | Nz | Nh  | f-nom  | f-act  | medium | torus   | epsxx  | epszz  |
|--------|-----|----|-----|--------|--------|--------|---------|--------|--------|
| 3.0000 | 80  | 20 | 100 | 0.3000 | 0.3004 | 1.0000 | 5.0000  | 1.7228 | 1.6859 |
| 3.0000 | 80  | 20 | 100 | 0.3000 | 0.3004 | 1.0000 | 10.0000 | 2.1836 | 2.0152 |

Las últimas dos columnas nos proporcionan las componentes del tensor dieléctrico macroscópico de este sistema.

## 3.2 Extensiones

Además de la teoría no retardada desarrollada en detalle en la sección 2.5, hemos desarrollado la teoría para poder calcular la respuesta dieléctrica en presencia de retardamiento (sección 2.4) y para sistemas no binarios, con tres o más componentes. También hemos extendido la teoría para poder calcular los campos electromagnéticos microscópicos y a partir de ellos calcular propiedades no lineales. Estas extensiones han sido incorporadas en el paquete *Photonic*.

### 3.3 Instalación

Para instalar el paquete *Photonic* es necesario instalar primero el paquete *PDL*. En un sistema *linux* basta emplear el comando `cpanm -look PDL` desde una línea de comandos. Debe leerse entonces el archivo `INSTALLATION` e instalar su lista de prerequisites manualmente para posteriormente invocar los comandos `perl Makefile.PL`, `make`, `make test` y `make install`. Posteriormente, el comando `cpanm Photonic` instala de manera automática nuestro sistema. Una vez instalado, el comando `perldoc Photonic` da acceso al manual en línea.

## 4 Resultados

En esta sección enumeraremos algunos de los resultados que hemos obtenido con la teoría y códigos descritos arriba.

### 4.1 Dicroísmo lineal y transmisión extraordinaria

El punto de inicio de nuestros cálculos es la función característica  $B(\mathbf{r})$ , consistente en unos y ceros, dependiendo de si  $\mathbf{r}$  se halla dentro del material  $B$  o  $A$ . Al discretizar el espacio real en 2D,  $B(\mathbf{r})$  se vuelve una representación binaria de una imagen pixelada. Por lo tanto, nuestro programa puede alimentarse *literalmente* de una imagen pixelada de alto contraste. Esto permite manipular la imagen usando herramientas gráficas y calcular las propiedades ópticas del sistema resultante. Ilustramos esto con la fig. 15, en cuyo lado izquierdo mostramos un corte de una red rectangular de agujeros cilíndricos con sección transversal elíptica en una matriz de plata. Manipulamos gráficamente la razón de aspecto de la red, y la excentricidad y orientación de las elipses. En la figura hemos elegido el valor 2 para la razón de aspecto de la red y escogimos 1.8 para la razón entre los semiejes de las elipses. En el lado derecho mostramos el espectro de reflectancia a incidencia normal de una película delgada, de  $100\text{\AA}$  de ancho, formada por este metamaterial. Mostramos dos conjuntos de datos, pues el material es anisótropo. Para cierta polarización, casi horizontal, el material se comporta como un metal ordinario con una alta reflectancia, cercana a  $R = 1$ . Sin embargo, para una polarización ortogonal, casi vertical hay un espectro de reflectancia con un mínimo profundo alrededor de  $\hbar\omega = 2.4\text{eV}$ , en que nuestra película muestra un dicroísmo extremo, i.e., casi toda la luz se refleja para una polarización y casi nada para la polarización ortogonal.[21] El mínimo de reflectancia puede entonarse a través de toda la región visible mediante cambios pequeños en la orientación  $\theta$  de las elipses. El motivo del dicroísmo extremo es que en la dirección vertical los caminos conductores se hallan casi estrangulados, pero abiertos. Por tanto, mientras que el sistema es un buen conductor para campos horizontales, es un mal conductor para campos verticales y para campos que oscilan rápidamente el sistema se comporta como un dieléctrico con resonancias relacionadas a los plasmones localizados en los cilindros. Por tanto, la permitividad en la dirección vertical es negativa a bajas frecuencias (comportamiento metálico) pero positiva y con resonancias a altas frecuencias (comportamiento dieléctrico). Interpolando entre ambos comportamientos, para alguna frecuencia intermedia la respuesta empata con la del

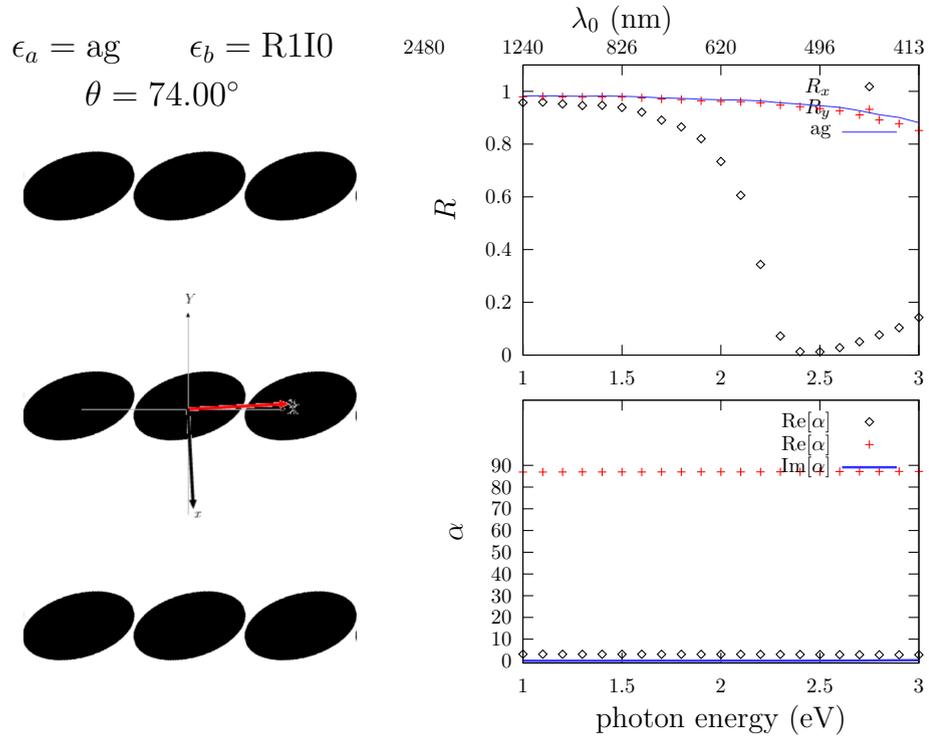


Figura 15: (Izquierda) Red rectangular con parámetros de red  $L_y = 2L_x$  de agujeros cilíndricos con razón de semiejes  $a = 1.8b$  en una matriz de plata. El semieje mayor está rotado  $\theta = 74^\circ$  con respecto a la vertical. (Derecha arriba) Espectro de reflectancia de una película delgada de ancho  $100\text{\AA}$  iluminada normalmente por luz linealmente polarizada a lo largo de los ejes principales del tensor dieléctrico, cuya dirección se indica a la izquierda y a la derecha abajo. Como referencia, se muestra la reflectancia de una película homogénea con la misma cantidad de Ag (línea continua). (Derecha abajo) Direcciones principales del tensor dieléctrico.

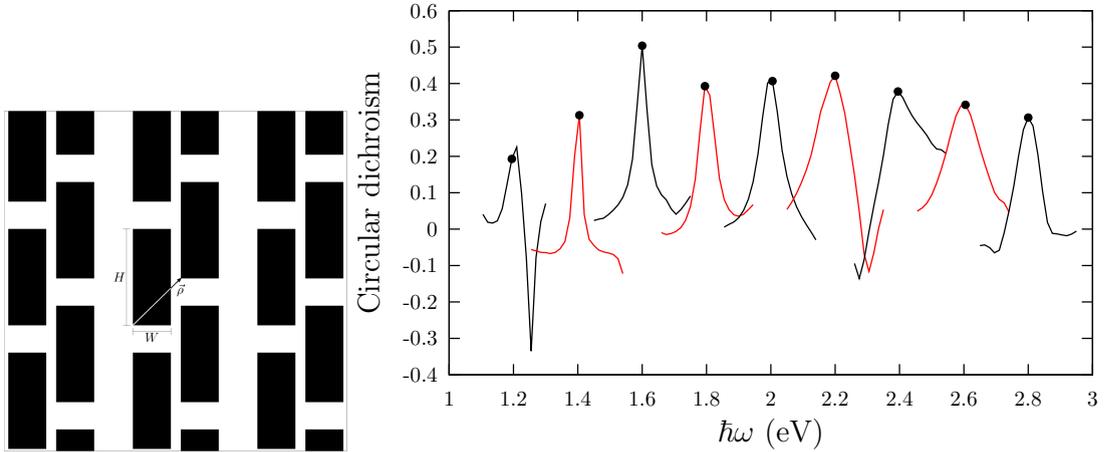


Figura 16: (Izquierda) Película de Ag depositada en vidrio con una red cuadrada de parejas de agujeros en forma de prismas rectangulares rellenos de un dieléctrico con permitividad  $\epsilon_b$ . El sistema está parametrizado por el ancho  $W$  y altura  $H$  de los prismas y el desplazamiento  $\rho$  entre parejas de agujeros en la celda unitaria. (Derecha) Dicroísmo circular de películas de 100nm de ancho con parámetros entonados para maximizar el dicroísmo a una frecuencia preestablecida (puntos).

vacío y el material adquiere una transparencia extraordinaria, lo cual contrasta con la alta reflectancia para una polarización ortogonal.

## 4.2 Dicroísmo circular

En la fig. 16 mostramos un sistema formado por una red cuadrada de parejas de agujeros en forma de prismas rectangulares en una película delgada de Ag colocada sobre un sustrato de vidrio. Los agujeros están rellenos de un dieléctrico con permitividad  $\epsilon_b$ . El sistema está parametrizado por el ancho  $W$  y alto  $H$  de los prismas y por el desplazamiento relativo  $\rho$  entre cada pareja. Notamos que este sistema no tiene simetría de reflexión a lo largo del plano, excepto para ciertos valores particulares del desplazamiento y que, aunque simétrica, su respuesta dieléctrica macroscópica es no hermitiana. Por lo tanto, los ejes principales en los que se diagonaliza el tensor dieléctrico de esta estructura son en general complejos, los modos propios respectivos corresponden a polarización elíptica y dependen en general de la frecuencia. Podemos aprovechar estas características del sistema para diseñar varios dispositivos ópticos. Como el cálculo reseñado en la sec. 2.6 es muy eficiente, podemos calcular espectros completos para cada una de las combinaciones de parámetros que surjan en una búsqueda automatizada del óptimo de cualquier propiedad deseada. [22] Por ejemplo, hemos hallado las combinaciones de parámetros que nos permiten obtener un máximo de dicroísmo circular, la diferencia entre la absortancia de la película cuando es iluminada con polarización circular derecha e izquierda, y situarlo en cualquier frecuencia deseada.[22] En el lado derecho de la fig. 16 mostramos fragmentos de los espectros de dicroísmo obtenidos, mostrando que podemos entonar su máximo a cualquier energía deseada en el espectro visible. Hacemos notar que el dicroísmo circular de los materiales naturales suele ser de apenas unas partes en mil, mientras

que aquí hemos encontrado señales de orden uno.

### 4.3 Magnetismo

La permitividad obtenida de acuerdo al procedimiento descrito en la sección 2.3 conduce a una permitividad que en general es *no-local*, es decir,  $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$  depende explícitamente del vector de onda  $\mathbf{k}$  además de depender de la frecuencia  $\omega$ . Una de las consecuencias esta no-localidad o *dispersión espacial*, es que la permitividad incluye información sobre la respuesta magnética del sistema. Para entender cómo un sistema no magnético adquiere propiedades magnéticas cuando se excita con un campo eléctrico cuya longitud de onda es del orden de las otras escalas de distancia del sistema, consideremos un cilindro metálico. Si iluminamos el cilindro con un campo cuya longitud de onda fuese el doble del diámetro del cilindro, entonces el campo eléctrico induciría corrientes en una dirección en la mitad del cilindro y en la dirección opuesta en la otra mitad, i.e., induciría una corriente que circularía alrededor del cilindro, generando un dipolo magnético de origen eléctrico.

Un procedimiento simple para extraer la respuesta magnética a partir de la dispersión espacial de la respuesta dieléctrica consiste en analizar la relación de dispersión de las ondas electromagnéticas en el medio no local,

$$k^2 = \epsilon_M(k, \omega) \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (55)$$

donde por simplicidad ignoramos el carácter tensorial de  $\epsilon$  y vectorial de  $k$ . Hacemos una expansión de Taylor

$$\epsilon_M(k, \omega) = \epsilon_M(0, \omega) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_M(0, \omega) + \dots, \quad (56)$$

respecto al número de onda para  $k$ 's pequeñas. El término lineal está ausente de esta expansión si el sistema es invariante frente a inversiones temporales. Sustitución en la ec. (55) conduce aproximadamente a

$$k^2 = \left( \epsilon_M(0, \omega) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_M(0, \omega) \right) \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (57)$$

Despejando  $k^2$  obtenemos

$$k^2 = \frac{\epsilon_M(0, \omega)}{1 - \frac{\omega^2}{2c^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_M(0, \omega)} \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (58)$$

la cual podemos escribir como

$$k^2 = \epsilon_M(\omega) \mu_M(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (59)$$

donde definimos  $\epsilon_M(\omega)$  como el límite local  $\epsilon_M(k \rightarrow 0, \omega)$  de la permitividad no local, y donde identificamos la permeabilidad local

$$\mu_M(\omega) = \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{2c^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_M(0, \omega)}. \quad (60)$$

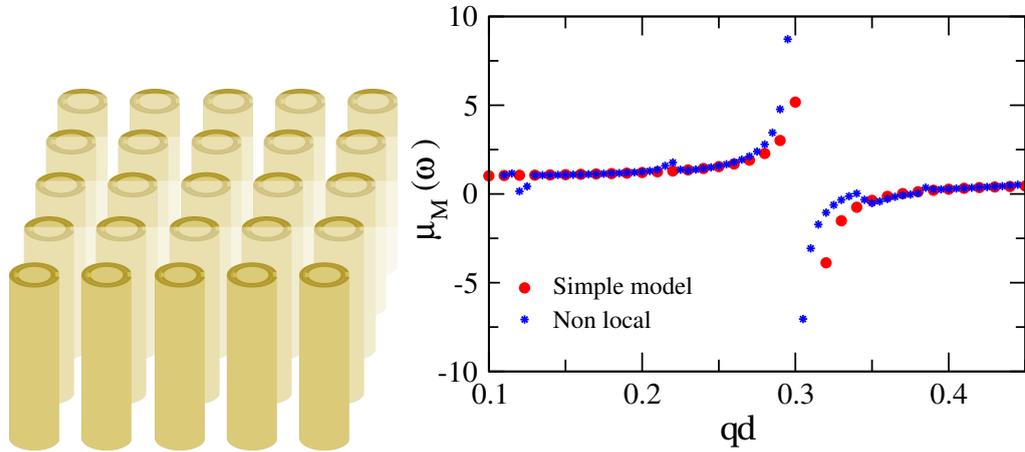


Figura 17: (Izquierda) Red cuadrada de parejas de cilindros metálicos cortados (split rings) anidados. Los cilindros están descritos por el modelo de Drude con frecuencia de plasma  $\omega_p = 20c/d$ , con  $d$  el parámetro de red. (Derecha) Permeabilidad magnética obtenida a partir de la dispersión espacial de la permitividad y a partir de un modelo simple para cilindros con paredes infinitesimales pero con la misma conductividad superficial. Los radios internos y externos de los anillos metálicos son  $0.26d$ ,  $0.32d$ ,  $0.34d$ , y  $0.4d$  y están interrumpidos por brechas de tamaño  $0.1d$ . Se emplearon 350 pares de coeficientes de Haydock en una retícula de  $401 \times 401$  pixeles.

En la fig. 17 mostramos un sistema formado por una red cuadrada, de anillos concéntricos truncados. Calculamos con *Photonic* la permeabilidad no local del sistema, y a partir de su dispersión espacial obtuvimos la permeabilidad magnética.[23] Del lado derecho mostramos el espectro de la permeabilidad  $\mu_M(\omega)$  como función de la frecuencia normalizada  $qd = \omega d/c$  para un sistema de anillos metálicos, descritos por una respuesta de Drude con frecuencia de plasma  $\omega_p = 20c/d$ , con  $d$  el parámetro de red. Los radios internos y externos de los anillos son  $0.26d$ ,  $0.32d$ ,  $0.34d$ , y  $0.4d$  y están interrumpidos por brechas de tamaño  $0.1d$ . Los cálculos fueron realizados en una retícula de  $401 \times 401$  pixeles y se emplearon 350 pares de coeficientes de Haydock. Como referencia, se muestran resultados de un cálculo simplificado para una red de anillos infinitamente delgados pero con una conductividad superficial que corresponde a los anillos sólidos. Hay un buen acuerdo entre ambos resultados. Se observa que alrededor de  $qd = 0.3$  aparece una resonancia en la permeabilidad, arriba de la cual adquiere valores negativos, por lo cual este sistema podría emplearse para construir un metamaterial izquierdo.

#### 4.4 Respuesta no lineal

Además de obtener la respuesta macroscópica, es posible obtener con una ligera extensión del formalismo presentado arriba el campo eléctrico microscópico en el seno de un metamaterial. El campo microscópico permite hacer cálculos de propiedades no lineales, tales y como la generación de segundo armónico proporcional al cuadrado del campo. En sistemas centrosimétricos, aquellos con simetría de inversión, no se pueden llevar a cabo procesos cuadráticos, en los que se absorben dos foto-

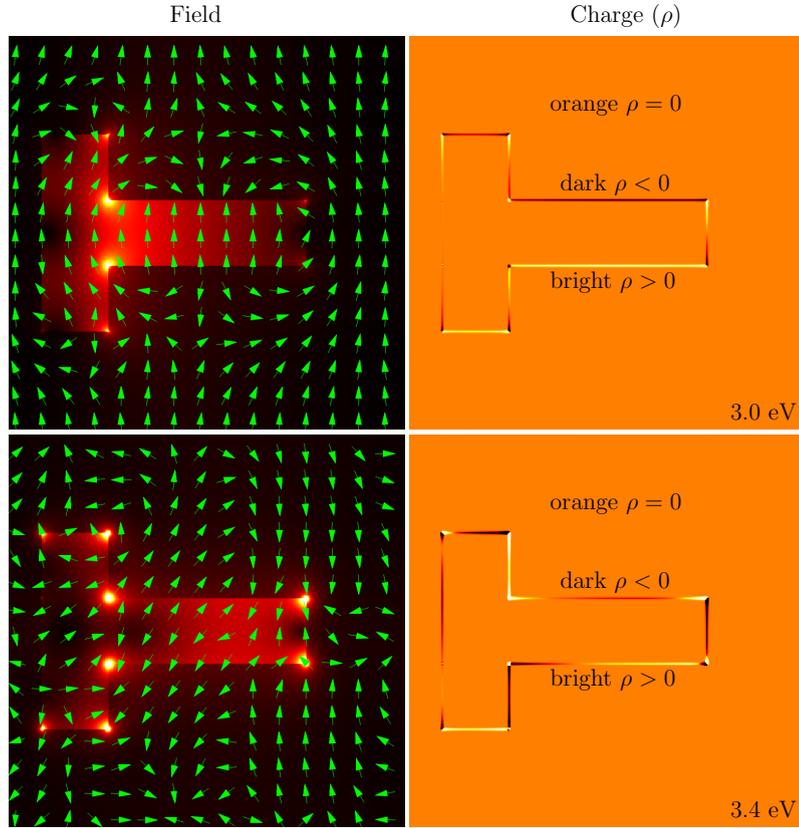


Figura 18: Magnitud y dirección del campo lineal microscópico (izquierda) y la densidad de carga inducida (derecha) en un metamaterial formado por una red de agujeros en forma de letra T en una matriz de Ag excitado por un campo polarizado en la dirección vertical para dos frecuencias resonantes. El carácter dipolar y cuadrupolar de las resonancias se advierte en los signos de la carga inducida y las direcciones del campo.

nes y se emite un fotón con la suma de sus energías. En particular, no se pueden llevar a cabo procesos de generación de segundo armónico, en que dos fotones de frecuencia  $\omega$  se combinen entre sí para dar lugar a un fotón de frecuencia  $2\omega$ . Sin embargo, en la vecindad de superficies estos procesos sí están permitidos, aunque para superficies centrosimétricas, las contribuciones de distintas partes opuestas de la superficie se cancelan mutuamente. Por esto es interesante calcular la respuesta no lineal de metamateriales formados por materiales centrosimétricos pero con geometrías no centrosimétricas. Como un ejemplo,[24] en la fig. 18 mostramos el campo lineal microscópico y la densidad de carga inducida en una red de agujeros no centrosimétricos con forma de letra T en el seno de una película de Ag. Debido a la no homogeneidad del campo lineal, en este sistema se induce una polarización cuadrática que oscila en el segundo armónico, como ilustra la fig. 19 para diversas direcciones de polarización del campo lineal macroscópico y diferentes frecuencias.

Notamos que los patrones no lineales son simétricos, como el sistema, ante una reflexión  $y \leftrightarrow -y$  cuando el campo  $\mathbf{E}_M$  apunta en las direcciones  $\hat{x}$  o  $\hat{y}$ , pero que esta simetría se pierde cuando el campo apunta en otras direcciones como la  $\hat{x} + \hat{y}$ .

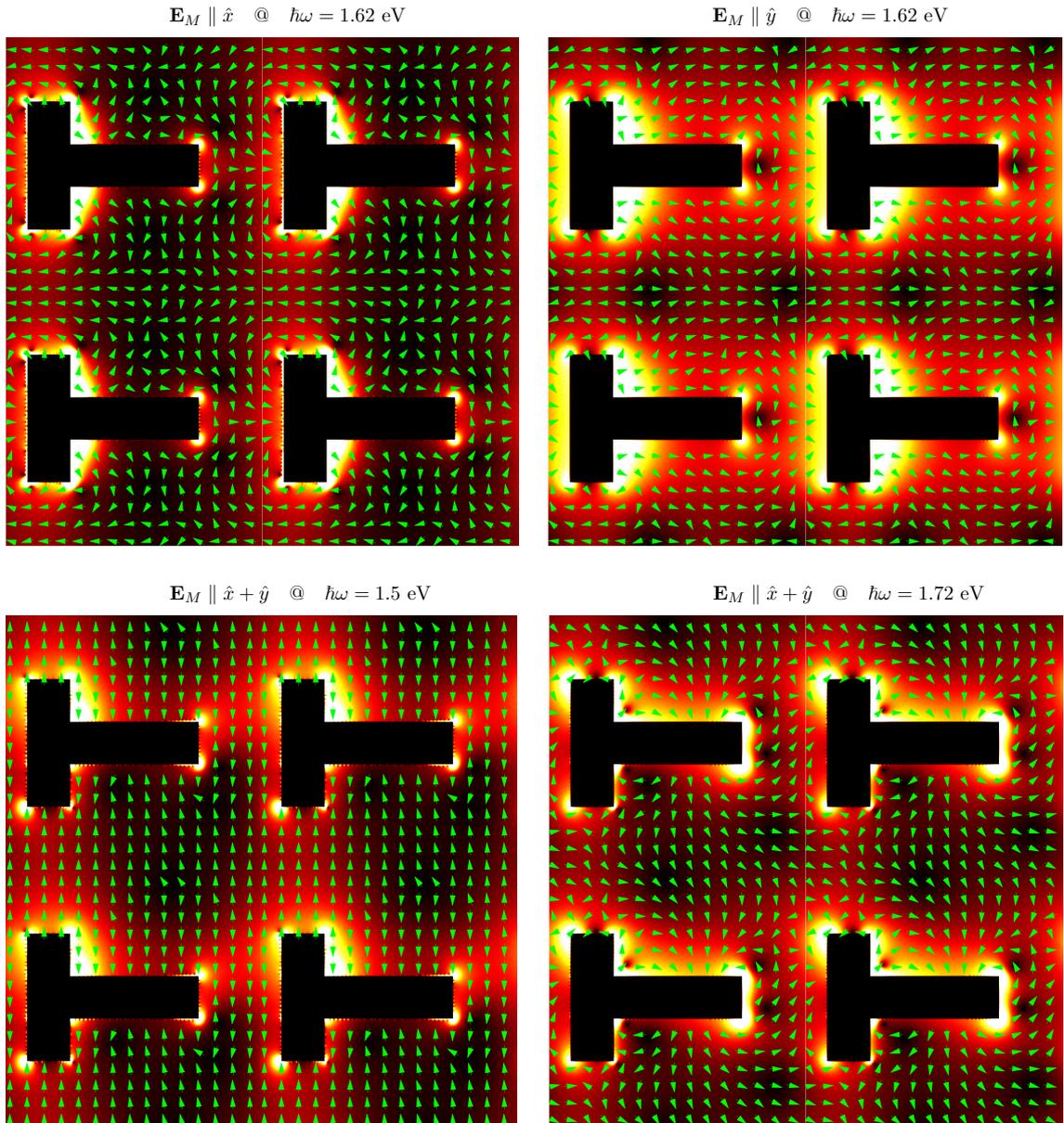


Figura 19: Magnitud y dirección de la polarización cuadrática no lineal inducida en el segundo armónico para el mismo sistema descrito en la fig. 18 para diversas frecuencias y diversas direcciones del campo eléctrico macroscópico lineal.

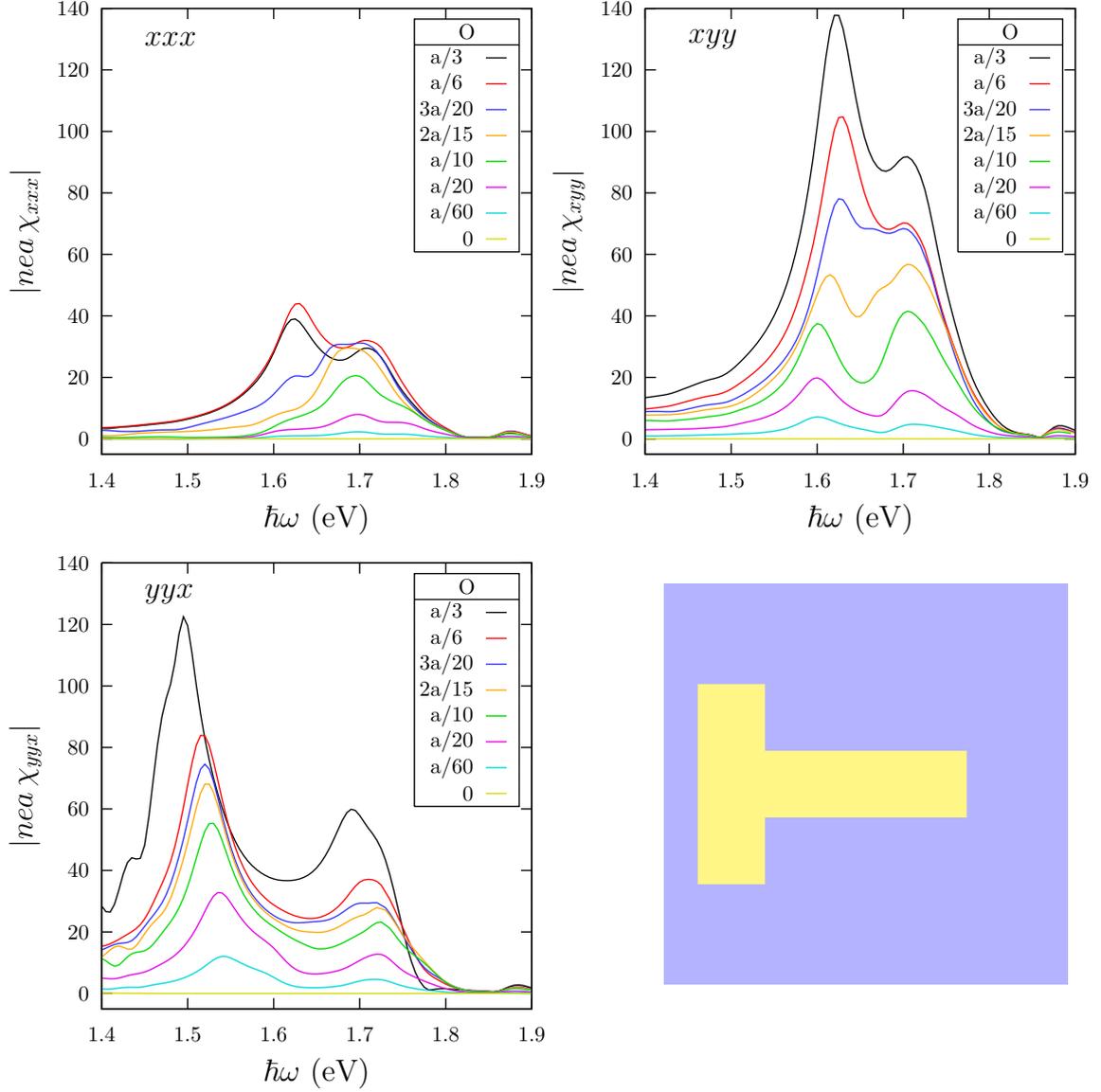


Figura 20: Distintas componentes de la susceptibilidad no lineal para generación de segundo armónico  $\chi_{ijk}$  para el sistema descrito en la figura 18 como función de la energía de los fotones fundamentales. Distintas curvas corresponden a las contribuciones de zonas a distintas distancias de la superficie.

A partir de la polarización no lineal podemos calcular todas las componentes del tensor de susceptibilidad no lineal del metamaterial y podemos optimizarlo a través de los parámetros geométricos del sistema. En la fig. 20 mostramos las componentes  $\chi_{ijk}(\omega, \omega; 2\omega)$  no nulas de la susceptibilidad cuadrática para la generación de segundo armónico en el sistema. La susceptibilidad típica de un material no centrosimétrico es del orden de  $1/nea_B$ , donde  $n$  es la densidad de número atómica,  $e$  la carga del electrón y  $a_B$  el radio de Bohr. Nuestros resultados muestran que un metamaterial hecho de componentes centrosimétricas pero con una geometría no centrosimétrica puede alcanzar en resonancia susceptibilidades del orden de  $100/nea$ , con  $a$  el parámetro de red. Por lo tanto, para materiales nanoestructurados, la respuesta no lineal de nuestros metamateriales puede ser competitiva con la de los materiales no lineales usuales.

## 5 Conclusiones

En este trabajo hemos presentado una introducción a los metamateriales y a algunas de sus múltiples propiedades, algunas exóticas, y aplicaciones. Luego desarrollamos una teoría basada en la identificación de operadores cuyo promedio tiene significado físico y a partir de los cuales podemos obtener las funciones respuesta macroscópicas del sistema y sus propiedades ópticas. También presentamos el método recursivo de Haydock, el cual aprovecha una analogía entre el cálculo de funciones respuesta macroscópicas y funciones de Green proyectadas para obtener algoritmos computacionales muy eficientes. Los diversos métodos desarrollados han sido implementados en paquetes computacionales modulares que han sido puestos en el dominio público. Como algunos ejemplos de su uso, presentamos el cálculo, diseño y optimización de propiedades ópticas lineales y no lineales como son la transmitancia extraordinaria, el dicroísmo lineal, el dicroísmo circular, las resonancias magnéticas y la generación de segundo armónico.

## 6 Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por DGAPA-UNAM mediante el proyecto IN111119. Parte del trabajo aquí reportado fue realizado en colaboración con varios colegas, incluyendo a Guillermo P. Ortiz, Bernardo S. Mendoza, José Samuel Pérez-Huerta, Lucila Juárez Reyes y Raksha Singla, así como sus grupos de trabajo y estudiantes.

## Referencias

- [1] Virtual Institute for Artificial Electromagnetic Materials and Meta-materials. <https://www.metamorphose-vi.org/>
- [2] *An introduction to metamaterials and nanophotonics*, Constantin Simovski y Sergei Tretyakov, (Cambridge University Press, Cambridge, 2021), ISBN:9781108492645. <http://www.cambridge.org/9781108492645>

- [3] *Plasmons*, W. Luis Mochán, en Reference Module in Materials Science and Materials Engineering, (Elsevier, Amsterdam, 2016) ed. por Saleem Hashmi. ISBN 9780128035818, [doi:10.1016/B978-0-12-803581-8.01192-9](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.01192-9).
- [4] *An investigation of the origin of the color of the Lycurgus cup by analytical transmission electron-microscopy*, Barber DJ y Freestone IC, *Archaeometry* **32** 33–45 (1990). [doi:10.1111/J.1475-4754.1990.TB01079.X](https://doi.org/10.1111/J.1475-4754.1990.TB01079.X).
- [5] *Theory of the optical properties of ionic crystal cubes*, Ronald Fuchs, *Physical Review B* **11** 1732, (1975). [doi:10.1103/PhysRevB.11.1732](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.11.1732).
- [6] *Experimental Verification of a Negative Index of Refraction*, Shelby, R. A., D. R. Smith, and S. Schultz. *Science* **292** 77–79 (2001). [doi:10.1126/science.1058847](https://doi.org/10.1126/science.1058847).
- [7] Chen, Hou-Tong, Antoinette J. Taylor, and Nanfang Yu, *A Review of Metasurfaces: Physics and Applications*, *Reports on Progress in Physics* **79** 076401 (2016). [doi: 10.1088/0034-4885/79/7/076401](https://doi.org/10.1088/0034-4885/79/7/076401).
- [8] *Metalenses at Visible Wavelengths: Diffraction-Limited Focusing and Sub-wavelength Resolution Imaging*, Khorasaninejad, Mohammadreza, Wei Ting Chen, Robert C. Devlin, Jaewon Oh, Alexander Y. Zhu, and Federico Capasso, *Science* **352** 1190–94 (2016). [doi:10.1126/science.aaf6644](https://doi.org/10.1126/science.aaf6644).
- [9] *Electromagnetic response of systems with spatial fluctuations. I. General formalism*, W. Luis Mochán y Rubén G. Barrera. *Phys. Rev. B* **32** 4984 (1985). [doi: 10.1103/PhysRevB.32.4984](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.32.4984).
- [10] *Efficient homogenization procedure for the calculation of optical properties of 3D nanostructured composites*, W. Luis Mochán, Guillermo P. Ortiz y Bernardo S. Mendoza, *Optics Express* **18** 22119 (2010). [doi:10.1364/OE.18.022119](https://doi.org/10.1364/OE.18.022119).
- [11] *Macroscopic optical response and photonic bands*, José Samuel Pérez-Huerta, Guillermo P. Ortiz, Bernardo S. Mendoza y W. Luis Mochán, *New Journal of Physics* **15** 043037 (2013). [doi:10.1088/1367-2630/15/4/043037](https://doi.org/10.1088/1367-2630/15/4/043037).
- [12] *The Recursive Solution of the Schrödinger Equation*, R. Haydock, *Solid State Physics* **35** 215 (1980) ed. por H. Ehrenreich, F. Seitz y D. Turnbull.
- [13] W. Luis Mochán, Guillermo Ortiz, Bernardo S. Mendoza, José Samuel Pérez-Huerta, Lucila Juárez Reyes, Raksha Singla y Merlyn Jaqueline Juárez-Gutiérrez, *Photonic*, <https://metacpan.org/pod/Photonic>.
- [14] W. Luis Mochán, Guillermo Ortiz, Bernardo S. Mendoza, José Samuel Pérez-Huerta, Lucila Juárez Reyes, Raksha Singla y Merlyn Jaqueline Juárez-Gutiérrez, *Photonic*, <https://github.com/wlmb/Photonic>.
- [15] W. Luis Mochán, *Perl Benchmark* <https://wlmb.github.io/2021/10/03/pdl/>.

- [16] *Perl Data Language: Scientific Computing with Perl*. <http://pdl.perl.org/>.
- [17] *PDL* <https://metacpan.org/pod/PDL>.
- [18] *Perl Data Language (PDL)*. <https://github.com/PDLPorters/pdl>.
- [19] *Moose - A postmodern object system for Perl 5*. <https://metacpan.org/pod/Moose>.
- [20] *Ejemplo de uso de Photonic para el cálculo de las propiedades ópticas de una red de toroides*.
- [21] *Birefringent Nanostructured Composite Materials*, Bernardo S. Mendoza y W. Luis Mochán, *Physical Review B* **85** 125418 (2012). [doi:10.1103/PhysRevB.85.125418](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.125418).
- [22] *Tailored Optical Polarization in Nanostructured Metamaterials*, Bernardo S. Mendoza y W. Luis Mochán, *Physical Review B* **94** 195137 (2016). [doi:10.1103/PhysRevB.94.195137](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.195137).
- [23] *Magnetic Response of Metamaterials*, Lucila Juárez-Reyes y W. Luis Mochán, *Physica Status Solidi (b)* **255** 1700495 (2018). [doi:10.1002/pssb.201700495](https://doi.org/10.1002/pssb.201700495).
- [24] *Second-Harmonic Generation in Nanostructured Metamaterials*, Ulises R. Meza, Bernardo S. Mendoza y W. Luis Mochán, *Physical Review B* **99** 125408 (2019). [doi:10.1103/PhysRevB.99.125408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.125408).