FACULTAD DE CIENCIAS Departamento de Física Aplicada



POLARIMETRÍA DE SISTEMAS DIFUSORES CON MICROESTRUCTURAS: EFECTOS DE DIFUSIÓN MÚLTIPLE

MEMORIA PRESENTADA POR

Juan Marcos Sanz Casado

PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR POR LA UNIVERSIDAD DE CANTABRIA

Santander, Julio de 2010

NOTA INFORMATIVA

Gráficos en baja resolución

Departamento de Física Aplicada Facultad de Ciencias Universidad de Cantabria

Tesis Doctoral

POLARIMETRÍA DE SISTEMAS DIFUSORES CON MICROESTRUCTURAS: EFECTOS DE DIFUSIÓN MÚLTIPLE

POLARIMETRY OF MICROSTRUCTURED SCATTERING SYSTEMS: MULTIPLE SCATTERING EFFECTS

Juan Marcos Sanz Casado

Santander, Julio de 2010

Director:

Dr. José María Saiz Vega

El Dr. José María Saiz Vega, Profesor Titular de Óptica de la Universidad de Cantabria, declara:

Que la presente Memoria, titulada "**Polarimetría de sistemas difusores con micro**estructuras: efectos de difusión múltiple ", ha sido realizada, bajo mi dirección, por Juan Marcos Sanz Casado, y constituye su Tesis para optar al grado de Doctor por la Universidad de Cantabria. Asimismo, emito mi conformidad para que dicha memoria sea presentada y tenga lugar, posteriormente, la correspondiente lectura.

Santander, a 23 de Julio de 2010

Fdo.: Dr. José María Saiz Vega

Agradecimientos

En primer lugar, agradezco a Andrea su comprensión, aliento y cariño, que tanto me han ayudado en el transcurso de este trabajo.

Gracias a los ejemplos más cercanos, que siempre son la primera referencia: A mi hermano Victor, *el emprendedor*, a mi prima Marimar, *la lectora*, a mi tía Lali, *la maestra*, y a mi tía Telvi, *la solidaria*. Gracias a mi madre, por sus años de cuidado y dedicación a la familia, y a mi padre, por todas y cada una de las habilidades que he podido vislumbrar o adquirir con el mero hecho de observar su forma de trabajar: Gracias a los dos por vuestro contínuo apoyo.

Gracias a aquellos que habéis estado ahí: Rosa, Emilia, Gelo, Salva, Jesús e Isabel, Jorge y Yoli. Y gracias por todas las carcajadas que las tres *pitufas*: Iria, Inés y María, habéis conseguido arrancarme. Sin ser estrictamente de la familia, ya forman parte de ella Toño, Benjamín y Candi, a los que agradezco su disposición y los buenos ratos que hemos compartido.

En el aspecto académico, debo agradecer al Dr. Francisco González y al Dr. Fernando Moreno la oportunidad que me dieron para trabajar en el grupo de óptica de la UC, hace ya algún tiempo, tras la cual no han dejado de alentarme. De igual modo, debo mencionar especialmente el buen hacer de mi Director, el Dr. José María Saiz, ya que su paciencia, su capacidad de análisis y su forma de compartir los conocimientos me han servido de mucha ayuda, tanto en el desarrollo de esta memoria, como en la resolución de todos los problemas cotidianos propios del trabajo en los laboratorios. Queridos Paco, Fernando y Chema: Muchas gracias.

Sin hacer de menos al resto de compañeros, hay dos que han compartido en mayor medida el entusiasmo y también las preocupaciones en mis primeros pasos como investigador en la UC: Makale, mi compañera de despacho, y Pablo, el hombre de las simulaciones. Gracias a todos los miembros del Grupo de Óptica actuales por los buenos momentos que hemos pasado: Manolo, Pedro, Lola, Rodri, Vidal, Miguel, Braulio y Borja; y gracias a aquellos con los que he coincidido aquí, especialmente al gran Olivier.

Mi estancia en Santander ha estado ligada, de forma inequívoca, a la apuesta por la I+D+i de la empresa HISBALIT, personificada en su gerente, D. Javier Guzmán, al que transmito en estas breves palabras mi agradecimiento.

En estos años como investigador, han sido fundamentales las técnicas que pude aprender de aquellos con los que me inicié en la investigación, y con los que compartí largas horas de laboratorio. No puedo dejar de dar las gracias al Dr. José Ignacio Calvo, la Dra. Laura Palacio y el Dr. Pedro Prádanos. Tampoco puedo dejar de lado a mi amigo cubano, el Dr. Daniel Jardines, gracias al cual tuve una agradable estancia en Génova que nunca olvidaré. La música ha tenido mucha importancia en mi vida: Mi participación en diversos coros y grupos de cámara (la *Polifónica*, el *Orfeón Trivés*, la *Camerata Coral de la UC*, la *Rondalla de San Román* y el grupo *Retales*) y los momentos como Director de *Augustine*, han ayudado mucho a mi bienestar personal. Gracias a todos los que habéis compartido conmigo los momentos de expansión musical, especialmente a los Maestros Javier Canduela y Antonio Noguera, al amigo Thales, a los miembros de la Camerata y a mis chicos: Sara, Sabri, Marimar, Oscar, Elena y Sandra. Además, debo aprovechar la ocasión para traer a la memoria a ese gran músico, maestro y amigo que fue D. Luis Olano.

Gracias también a los que han compartido, en los últimos tiempos, mis momentos de asueto jugando al Squash, en particular a mi monitora Icíar, aunque mi oído derecho comience a padecer ya los síntomas de sus instrucciones.

Hace algunos años tuve la oportunidad de trabajar y vivir en Barcelona, donde me encontré como en casa gracias a las Hermanas de la Escola Infant Jesus, y a los chicos y chicas que trabajaban con los niños. No puedo recordar a todos, pero seguro que Mireia Galobart, la directora del centro, me ayuda a transmitirles mi gratitud: Gracias Mireia.

Los amigos de la infancia y de la juventud siempre están ahí, ahora con familia propia: David y Soni, Rubén y Eli (y Jesús), Rebe y Alberto, Richard y Rocío, Julio e Irene, Alex y Rocío, ... Ellos, al igual que el resto de la panda de San Román, están impacientes por ver esto acabado de una vez. No puedo dejar atrás a mis amigos de Valladolid: Pala, Jorge, Pablo, Mónica, María, Natalia, Bea y Chema. Desde la distancia, gracias por tan buenos momentos.

Es seguro que no están todos los que son, pues la memoria es caprichosa, pero son todos los que están...

...lo demás es silencio...

A mis padres, Esther y Noé: su tesón, su trabajo y su sacrificio han sido los Doctores cuyas lecciones magistrales me han ayudado a llegar hasta aquí

ANNALEN DER PHYSIK.

BEGRÜNDET UND PORTOEPÜHET DURCH F. A. C. GREN, L. W. GILBERT, J. C. POGGENDORFF, G. U. E. WIEDEMANN, P. DRUDE.

VIERTE FOLGE.

BAND 25.

der ganzen beine 330. band.

KURATORIUM: F. KOHLRAUSCH, M. PLANCK, G. QUINCKE, W. C. RÖNTGEN, E. WARBURG.

UNTER MITWIRKUNG

DEE DEUTSCHEN PHYSIKALISCHEN GESELLSCHAFT

UND INSERSONDERE VON M. PLANCK

HERAUSGEGEREN VON

W. WIEN UND M. PLANCK.

MIT EINEM PORTRÄT UND FÜNF FIGURENTAFELN.



LEIPZIG, 1908. VERLAG VON JOHANN AMBROSIUS BARTH.

1908.

№ 3.

ANNALEN DER PHYSIK.

VIERTE FOLGE. BAND 25.

1. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen; von Gustav Mie.



Fig. 17. Strahlungsdiagramm eines unendlich kleinen Goldkügelchens.



Fig. 18. Strahlungsdiagramm eines Goldkügelchens von 160 µµ Durchm.



Fig. 19. Strahlungsdiagramm eines Goldkügelchens von 180 µµ Durchm.

Figura 1: Recortes del artículo original de G. Mie (1908): Solución al campo difundido por una esfera.

Índice general

1.	Intr	oducción y Objetivo	1
	1.1.	Introducción	1
	1.2.	Objetivo de la Tesis	3
2.	Difu	isión de la Luz	5
	2.1.	Teoría Electromagnética	5
		2.1.1. Ecuaciones de Maxwell v Campos Armónicos	5
		2.1.2. Propagación de Ondas Planas	7
		2.1.3. Beflexión y Transmisión	8
	2.2	Difusión por Estructuras	11
	2.2.	2.2.1 Difusión por una Partícula Aislada en un Medio Homogéneo	12
		2.2.2. Difusión por una Partícula Sobre un Substrato	23
		2.2.2. Difusión Múltiple	26
	23	Polarimetría	26
	2.9.	2 3 1 Formalismos de Jones Stekes y Mueller	20 97
		2.3.1. Formansmos de Jones, Stokes y Muener	20 20
		2.3.2. Representaciones Matriciales de Medios Opticos	50 20
		2.3.3. Dispositivos de Medida	52
3.	Des	composición Polar	39
	3.1.	Principios Fundamentales	39
		3.1.1. Criterio de Coherencia	41
		3.1.2. Concepto de Pureza	42
		3.1.3. Concepto de Despolarización	44
		3.1.4. Descomposición Polar en Sistemas No Despolarizantes	46
		3.1.5. Descomposición Polar en Sistemas Despolarizantes	46
		3.1.6. Otros Tipos de PD en Sistemas Despolarizantes	48
	3.2.	Aplicabilidad	50
		3.2.1. Esfera Aislada	50
		3.2.2. Par de Esferas Metálicas	56
		3.2.3. Superposición Incoherente de Estados	58
1	Diar	agitive Experimental	31
4.		Anólisis de Componentes	61
	4.1.	Analisis de Componentes	91 61
		4.1.1. Laser y Folarizadores	6.0 DT
		4.1.2. Elección de Compensadores)) C 4
	4.0	4.1.3. Otros Elementos	34 co
	4.2.	Puesta en Marcha y Calibrado	39 79
		4.2.1. Polarimetro de Compensador Dual Rotatorio (DRCP)	(2
		4.2.2. Polarimetro de Stokes	30
	4.3.	Medidas en Sistemas Sencillos	32
		4.3.1. Transmisión	32
		4.3.2. Reflexión	33
		4.3.3. Difusión	90

	4.4.	Elaboración de Muestras	91
		4.4.1. Procedimiento Manual	91
		4.4.2. Muestras Fotolitográficas	93
5.	Res	ultados Experimentales	99
	5.1.	Estructuras tipo "Rib"	102
		5.1.1. Ribs de Silicio: Variación con el Tamaño	102
		5.1.2. Ribs de Silicio: Variación con la Distancia	107
		5.1.3. Ribs de Oro: Variación con el Tamaño	109
		5.1.4. Ribs de Oro: Variación con la Distancia	112
	5.2.	Estructuras tipo "Groove"	114
		5.2.1. Grooves de Silicio: Variación con el Tamaño	114
		5.2.2. Grooves de Silicio: Variación con la Distancia	116
		5.2.3. Grooves de Oro: Variación con el Tamaño	118
		5.2.4. Grooves de Oro: Variación con la Distancia	120
	5.3.	Simetría	122
	5.4.	Despolarización	126
	5.5.	Diferenciación Rib-Groove	129
		5.5.1. Análisis Convencional de la Matriz de Mueller	129
		5.5.2. Análisis Mediante PD	130
	5.6.	Partículas	134
		5.6.1. Nanopartículas en Coloide: Nanosizing	134
		5.6.2. Depósitos sobre Sustrato	139
	5.7.	Medios Densos	144
	5.8.	Metrología	144
		5.8.1. Medidas sobre un Polarizador	146
		5.8.2. Medidas sobre un Retardador	146
6.	Con	nclusiones y Trabajo Futuro	151
	6.1.	Tareas Realizadas	151
	6.2.	Conclusiones	151
	6.3.	Perspectiva de Futuro	153
А.	Cál	culo de Fourier	155
в.	Con	npendio de Resultados	165
Di	Difusión de Resultados: Publicaciones y Congresos 1		

Índice de figuras

1.	Recortes del artículo de G. Mie	Х
2.1. 2.2. 2.3.	Esquema de la reflexión y transmisión de una onda electromagnética	9 11
0.4	Vidrio BK7	12
2.4. 2.5.	Representaciones graficas del problema de difusion por una particula	12
2.6	nm	$15 \\ 17$
2.0. 2.7.	Trazado de rayos para un experimento de difusión por una partícula con $r = a \gg \lambda$.	21
2.8. 2.9.	Difusión por una partícula sobre un substrato.	23 27
2.10. 2.11.	Esquema general de un dispositivo polarimétrico	33 36
3.1.	Difusión por una esfera aislada: (a) Esquema geométrico y (b) Simulación del campo.	51
3.2. 3.3.	Esfera de Plata aislada	53 55
3.4.	Geometrías experimentales de la difusión por un par de esferas	56
3.5. 3.6	Evolución de las magnitudes polarimétricas en la difusión por un par de esferas Simulaciones de la difusión por un par de partículas en campo cercano	57 57
3.7.	Pureza de la matriz de Mueller y Capacidad de Despolarización resultante del PD, en función del ángulo de scattering (θ) , en sistemas de dos partículas (Ag) por suma	
3.8.	incoherente de estados	58
3.9.	(Ag, $r = 0, 1\lambda$; $a = 0, 1\lambda$) por suma inconerente de estados	59
3.10.	(Ag, $r = 0, 2\lambda$; $d = 0, 1\lambda$) por suma incoherente de estados	59
	(Ag, $r = 0, 4\lambda$; $d = 0, 1\lambda$) por suma incoherente de estados	60
4.1.	Dispositivo Experimental.	62
4.2. 4.3.	Características de emisión en intensidad del laser He:Ne	63 64
4.4.	Medidas de linealidad en el Detector 1 para $\lambda = 633$ nm. $OD = 0$ corresponde a una patencia incidente de 5 mW	65
4.5.	Perfil del haz láser (He:Ne) en la posición de la muestra.	66
4.6.	Fotografías del dispositivo polarimétrico.	70
4.7. 4.8.	Imagenes del PSG, del anclaje de la muestra y del PSA	71
4.9. 4.10.	paso de la Lámina 1	74 75 76

4.11.	Capturas de pantalla del programa de control del polarímetro.	79
4.12.	Captura de pantalla en el transcurso de una medida del DRCP	80
4.13.	Captura de pantalla en el transcurso de una medida del SP	82
4.14.	Matriz de Mueller experimental para la reflexión en una interfase de Vidrio BK7	84
4.15.	Matriz de Mueller experimental para la reflexión en una interfase de Vidrio BaK1	85
4.16.	Matriz de Mueller experimental para la reflexión en una interfase de Oro	86
4.17.	Reflexión total en un prisma: Geometría del problema.	87
4.18.	Matriz de Mueller experimental para la reflexión total en Vidrio BK7	87
4.19.	Matriz de Mueller experimental para la reflexión total en Vidrio BaK1	88
4.20.	Difusión por una superficie de spectralon	89
4.21.	Difusión por una superficie de escavola	90
4.22.	Difusión de una disolución de partículas de Poliestireno de 3 μ m (0.001% sólido) en	
	α -glucosa 1M	92
4.23.	Deposición de fibras sobre substrato: Dispositivo de deposición y muestra fabricada.	92
4 24	Fotografía de una muestra de partículas de Poliestireno de 1.1 µm (Microscopio Óptico	0-
	$\times 100$).	93
4.25	Esquema positivado de la máscara fotolitográfica	94
4 26	Imagen de dos <i>ribs</i> obtenida por microsconía electrónica de barrido (SEM $\times 6000$)	94
4 27	Imagen de lemento 6B-F de una oblea de Silicio (Microscopio Óptico ×100)	95
4.28	Imagenes de imperfecciones en diferentes elementos de dos obleas de Silicio de alturas	50
1.2 0.	$1 \ \mu m \ v \ 2 \ \mu m$ (Microscopio Óptico $\times 100$)	96
1 20	Perfilometría del ataque en una oblea medida con un perfilómetro de contacto	97
4.29.	Defecto de fabricación en el elemento 5C, correspondiente a una oblea de Silicio 2 um	31
4.50.	de altura (Microscopio Óptico, $\times 100$)	07
1 21	Imagenes de pares de estructures obtenide per microscopía electrónico (SEM $\times 2000$)	91
4.31.	imagenes de pares de estructuras obtenida por inicroscopia electronica (SEM, ×3000).	90
5.1.	Parámetros de despolarización para una $rib \ 1 \times 3$ de Si	100
5.2.	Parámetros de despolarización para una $rib \ 1 \times 4$ de Si	100
5.3.	Parámetros de despolarización para una <i>groove</i> 1 × 3 de Si	100
5.4.	Parámetros de despolarización para una <i>groove</i> 1 × 4 de Si	100
5.5.	Perfil de dos <i>ribs</i> : Magnitudes de la Muestra $(h \times w - d)$.	102
5.6.	Patrones de difusión del parámetro m_{00} calculados mediante ET para una <i>rib</i> de Au:	
	a) variación con la altura h , b) variación con la anchura w .	103
5.7.	Difusión (medida con el SP) por una <i>rib</i> de Si $(2 \times 1 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de	
	Mueller v los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	104
5.8.	Difusión (medida con el SP) por una <i>rib</i> de Si $(2 \times 4 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de	
	Mueller v los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) ,	104
5.9.	Difusión (medida con el SP) por una <i>rib</i> de Si $(2 \times 3 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de	
	Mueller v los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) ,	106
5.10	Difusión (medida con el DBCP) por una <i>rib</i> de Si $(1 \times 3 \ \mu m)$: Evolución de la matriz	100
0.10.	de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) ,, θ	106
5.11	Difusión (medida con el DBCP) por dos <i>ribs</i> de Si $(1 \times 3 - 4 \mu m)$: Evolución de la	100
	matriz de Mueller v los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .	108
5 1 2	Difusión (medida con el DBCP) por dos <i>ribs</i> de Si $(1 \times 3 - 7 \mu m)$: Evolución de la	100
0.12.	matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	108
5 13	Difusión (medida con el SP) por una <i>rib</i> de Au $(2 \times 1 \mu m)$: Evolución de la matriz de	100
0.10.	Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	110
5.14	Difusión (medida con el SP) por una <i>rib</i> de Au $(2 \times 4 \text{ µm})$. Evolución de la matriz de	110
0.14.	Entation (incutité con ci of) por une iio de ru (2 \wedge + μ in). Evolucion de la matriz de	110
	Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (A)	110
5 15	Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) Difusión (medida con el SP) por una <i>rih</i> de Au (2 × 3 µm): Evolución de la matriz de	110
5.15.	Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) Difusión (medida con el SP) por una <i>rib</i> de Au $(2 \times 3 \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	110
5.15. 5.16	Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) Difusión (medida con el SP) por una <i>rib</i> de Au $(2 \times 3 \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) Difusión (medida con el DBCP) por una <i>rib</i> de Au $(1 \times 3 \mu m)$: Evolución de la matriz	110
5.15. 5.16.	Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) Difusión (medida con el SP) por una <i>rib</i> de Au $(2 \times 3 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) Difusión (medida con el DRCP) por una <i>rib</i> de Au $(1 \times 3 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .	110 111 111

5.17	. Difusión (medida con el DRCP) por dos <i>ribs</i> de Au $(1 \times 3 - 4 \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	113
5.18	. Difusión (medida con el DRCP) por dos <i>ribs</i> de Au $(1 \times 3 - 7 \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .	113
5.19	. Difusión (medida con el DRCP) por una groove de Si $(1 \times 3 \ \mu\text{m})$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	115
5.20	. Difusión (medida con el DRCP) por una <i>groove</i> de Si $(1 \times 4 \ \mu\text{m})$: Evolución de la matriz	110
0.20	de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	115
5.21	. Difusión (medida con el DRCP) por dos grooves de Si $(1 \times 3 - 4 \mu m)$: Evolución de la	
	matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	117
5.22	. Difusión (medida con el DRCP) por dos grooves de Si $(1 \times 3 - 7 \mu m)$: Evolución de la	
r 00	matriz de Mueller y los parametros PD en función del ángulo de scattering (θ)	117
5.23	. Dirusion (medida con el DRCP) por una groove de Au (1 × 1 μ m): Evolucion de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	118
5.24	Difusión (medida con el DBCP) por una <i>groove</i> de Au $(1 \times 3 \mu m)$: Evolución de la	110
0.24	matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	119
5.25	. Difusión (medida con el DRCP) por una <i>groove</i> de Au $(1 \times 4 \ \mu m)$: Evolución de la	
	matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	119
5.26	. Difusión (medida con el DRCP) por dos grooves de Au $(1 \times 3 - 4 \ \mu m)$: Evolución de la	
	matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	121
5.27	. Difusión (medida con el DRCP) por dos grooves de Au $(1 \times 3 - 7 \mu m)$: Evolución de la	101
F 9 9	matriz de Mueller y los parametros PD en funcion del angulo de scattering (θ)	121
0.28	Instriz pura y matriz de despoiarización para una 770 de Au (1 × 5 μ m): Evolución de los elementos en función del ángulo de scattering (θ)	123
5.29	Difusión por una <i>rib</i> de Silicio (elemento E4, $2 \times 2 - 3 \mu m$)	120
5.30	Difusión por el substrato de Silicio (elemento E4) y esquemas de medida.	125
5.31	. Relación de despolarización para la luz difundida por una estructura de Au $(1 \times 4 \ \mu m)$	
	$rib/groove$ (punto negro), y por una groove $(1 \times 4 \ \mu m)$ de Au/Si (triángulo rojo).	126
5.32	. Relación entre las eficiencias de despolarización asociadas a los distintos parámetros d_i	
	para estructuras de $1 \times 4 \ \mu m$	127
5.33	. Relación entre las eficiencias de despolarización asociadas a los parámetros d_i para los substratos de las distintas estructuras	128
5.34	. Eficiencia de despolarización total entre substrato y estructuras de Si de $1 \times 4 \mu m$ (con y sin suavizado de las curvas).	128
5.35	. Transmitancia total (m_{00}) de las distintas geometrías: Comparación con modelos di-	
	fraccionales e interferenciales.	130
5.36	. Evolución angular de φ,δ y ρ para distintas geometrías tipo rib y groove en Au y Si	131
5.37	. a) Elementos m_{ij} vs. θ para una estructura de Silicio $(1 \times 3 \ \mu m)$: Rib (negro) y groove	
	(rojo), b) Arriba: Parametros PD correspondientes con la rio a), y Abajo: Parametros PD para la <i>groque</i> equivalente b) Los gráficos centrales muestran el desfase δ obtenido	
	vía PD. c) Pendiente de δ para una $rib/groove$ obtenida a través del PD. Las barras	
	b/n muestran el signo dominante de la pendiente	132
5.38	. Gráficos de δ (arriba) y del signo de la pendiente de δ (abajo) para diferentes geometrías	
	y composiciones.	132
5.39	. Difusión por nanopartículas (Au, $r = 50$ nm): Evolución de los elementos de la matriz	
	de Mueller en función del ángulo de scattering (θ) para muestras reales y simulación	194
5 40	Difusión por nanopartículas (Au $r = 50$ nm). Evolución de los parámetros PD on	104
0.40	función del ángulo de scattering (θ) para muestras reales v simulación teórica	135
5.41	. Difusión por nanopartículas (Au, $r = 50$ nm, 70 μ l/ml): Evolución de los parámetros	
	de despolarización en función de θ	135

5.4	2. Difusión por nanopartículas (Au, $r = 100$ nm): Evolución de los elementos de la matriz de Mueller en función del ángulo de scattering (θ) para muestras reales y simulación	
	teórica.	136
57	13 Difusión por nanopartículas (Au $r = 100$ nm): Evolución de los parámetros PD en	
0	función del ángulo de scattering (A) para muestras reales y simulación teórica	137
F /	A Diferition del angulo de scattering (0) para indestras reales y sinduación teorica	107
J. 4	44. Diffusion por nanoparticulas (Au, $r = 100$ nm, 10 μ 1/m1): Evolucion de los parametros	107
_	de despoiarización en función de θ .	137
5.4	15. Nanoesteras de Ag ($r = 50$ nm y $r = 65$ nm): Parámetros PD para $\theta = 90^{\circ}$	138
5.4	46. Nanoesferas de Ag ($r = 20 \text{ nm y } r = 30 \text{ nm}$): Parámetros PD para $\theta = 90^{\circ}$ y eficiencias	
	de difusión	138
5.4	17. Nanoesferas de Ag: Tendencia de los mínimos en $\Delta\delta$ para $\theta = 90^0$ en función del tamaño	0.138
5.4	18. Difusión por partículas (Au, $r = 1,1 \ \mu m$) sobre sustrato (Au): Evolución de los elemen-	
	tos de la matriz de Mueller en función del ángulo de scattering (θ)	139
5.4	19. Difusión por partículas (Au, $r = 1.1 \ \mu m$) sobre sustrato (Au): Evolución de los paráme-	
0.	tros PD en función del ángulo de scattering (θ)	140
5 5	50 Difusión por partículas (Au $r = 3.3 \mu m$) sobre sustrate (Au): Evolución de los elemen	110
0.0	tos de la matriz de Mueller en función del ángulo de sectoring (A)	1/1
	tos de la matriz de Muener en función del angulo de scattering (θ)	141
5.5	D1. Difusion por particulas (Au, $r = 3.3 \ \mu m$) sobre sustrato (Au): Evolucion de los parame-	1 4 1
	tros PD en funcion del angulo de scattering (θ)	141
5.5	52. Intensidad difundida (I_S) por partículas (Au) sobre sustrato (Au) en función del ángulo	
	de scattering (θ)	141
5.5	53. Difusión por una fibra (Au, $r \simeq 3.7 \ \mu m$) sobre sustrato (Au): Evolución de los elementos	
	de la matriz de Mueller en función del ángulo de scattering (θ)	143
5.5	54. Difusión por una fibra (Au, $r \simeq 3.7 \ \mu m$) sobre sustrato (Au): Evolución de los paráme-	
	tros PD en función del ángulo de scattering (θ)	143
5.5	55. Intensidad difundida (I_S) por dos fibras (Au) sobre sustrato (Au) en función del ángulo	
	de scattering (θ) .	143
5.5	66. Parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) para una muestra turbia de	
	partículas de Latex en suspensión acuosa $(r = 3.3 \ \mu m)$.	145
5.5	57 Parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) para una muestra turbia de	
0.0	partículas de Latex en suspensión acuosa (concentración de α -glucosa 1 $M_{c}r = 3.3 \mu m$)	145
5 5	particulas de Latex en suspensión actosa (concentración de la gracosa 1 M, $7 = 0.0 \mu m$)	.110
J.e	os función de la concentración (co inclusio la medida realizada por la suspensión de	
	en funcion de la concentración (se incluye la medida realizada para la suspensión de	145
	particulas de Latex, $r = 5.5 \ \mu \text{m}$).	140
5.5	99. Perfil de la matriz de Mueller de un Polarizador a lo largo de 10 mm	146
5.6	50. Evolución transversal (a lo largo de 10 mm) de los parámetros resultantes de la aplica-	
	ción del PD a un Polarizador Lineal. De izquierda a derecha: El azimut α , la elipticidad	
	β y la transmitancia de un estado propio t_1	147
5.6	61. Perfil de la matriz de Mueller de una Lámina $\frac{\lambda}{4}$ a lo largo de 6 mm	147
5.6	62. Evolución transversal (a lo largo de 6 mm) de los parámetros resultantes de la apli-	
	cación del PD a una Lámina $\frac{\lambda}{4}$. Parámetros de: (a) Diatenuación, (b) Retardo y (c)	
	Despolarización.	148
5.6	$53.$ Evolución transversal (superficie de $8 \times 10 \text{ mm}$) de la matriz de Mueller y los parámetros	
	PD principales de una Lámina $\frac{\lambda}{4}$	149
	<u>+</u>	
В.	1. Difusión (medida con el DRCP) por una rib de Si $(1 \times 1 \ \mu m)$: Evolución de la matriz	
	de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	165
В.	2. Difusión (medida con el DRCP) por una <i>rib</i> de Si $(1 \times 4 \mu m)$: Evolución de la matriz	
	de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	166
В.	3. Difusión (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Si $(2 \times 3 - 4 \mu m)$: Evolución de la matriz	
	de Mueller v los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .	166
в	4 Difusión (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Si $(2 \times 3 - 5 \text{ µm})$; Evolución de la matriz	
D .	de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (A)	167
	(v)	101

B.5. Difusión (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Si $(2 \times 3 - 6 \mu m)$: Evolución de la matriz	
de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	167
B.6. Difusión (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Si $(2 \times 3 - 7 \mu m)$: Evolución de la matriz	
de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	168
B.7. Difusión (medida con el SP) por dos ribs de Si $(2 \times 3 - 8 \ \mu m)$: Evolución de la matriz	
de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	168
B.8. Difusión (medida con el DRCP) por dos ribs de Si $(1 \times 3 - 5 \mu m)$: Evolución de la	
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	169
B.9. Difusión (medida con el DRCP) por dos ribs de Si $(1 \times 3 - 6 \mu m)$: Evolución de la	
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	169
B.10. Difusión (medida con el DRCP) por dos ribs de Si $(1 \times 3 - 8 \ \mu m)$: Evolución de la	
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	170
B.11.Difusión (medida con el DRCP) por una <i>rib</i> de Au $(1 \times 1 \ \mu m)$: Evolución de la matriz	
de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	170
B.12.Difusión (medida con el DRCP) por una <i>rib</i> de Au $(1 \times 4 \mu m)$: Evolución de la matriz	
de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	171
B.13. Difusión (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Au $(2 \times 3 - 4 \mu m)$: Evolución de la matriz	
de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	171
B.14. Difusión (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Au $(2 \times 3 - 5 \mu m)$: Evolución de la matriz	
de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	172
B.15. Difusión (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Au $(2 \times 3 - 6 \mu m)$: Evolución de la matriz	1 = 0
de Mueller y los parametros PD en función del ángulo de scattering (θ)	172
B.16. Difusión (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Au $(2 \times 3 - 7 \mu m)$: Evolución de la matriz	1 70
de Mueller y los parametros PD en funcion del angulo de scattering (θ)	173
B.17. Difusion (medida con el SP) por dos <i>ribs</i> de Au $(2 \times 3 - 8 \mu m)$: Evolucion de la matriz	179
de Mueller y los parametros PD en funcion del angulo de scattering (θ)	173
D.13. Difusion (medida con el DRCF) por dos rios de Au ($1 \times 3 - 5 \mu m$). Evolución de la matriz de Mueller y les parémetres PD en función del ángula de secttoring (A)	174
B 10 Difusión (modida con el DPCP) por des <i>min</i> e de Au $(1 \times 2 - 6 \text{ µm})$; Evolución de la	114
B.19. Difusion (medida con el Difer) por dos <i>nos</i> de Au ($1 \times 5 = 0$ µm). Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	174
B 20 Difusión (medida con el DBCP) por dos <i>ribs</i> de Au $(1 \times 3 - 8 \mu m)$: Evolución de la	114
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	175
B 21 Difusión (medida con el DBCP) por una <i>groove</i> de Si (1 × 1 µm): Evolución de la matriz	110
de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	175
B 22 Difusión (medida con el DRCP) por dos <i>grooves</i> de Si $(1 \times 3 - 5 \mu m)$: Evolución de la	110
matriz de Mueller v los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) ,,	176
B.23. Difusión (medida con el DRCP) por dos <i>grooves</i> de Si $(1 \times 3 - 6 \mu m)$: Evolución de la	
matriz de Mueller v los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	176
B.24.Difusión (medida con el DRCP) por dos <i>grooves</i> de Si $(1 \times 3 - 8 \mu m)$: Evolución de la	
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	177
B.25.Difusión (medida con el DRCP) por dos <i>grooves</i> de Au $(1 \times 3 - 5 \mu m)$: Evolución de la	
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	177
B.26.Difusión (medida con el DRCP) por dos grooves de Au $(1 \times 3 - 6 \mu m)$: Evolución de la	
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	178
B.27.Difusión (medida con el DRCP) por dos grooves de Au $(1 \times 3 - 8 \mu m)$: Evolución de la	
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	178
B.28. Difusión (medida con el SP) por un a rib de Si $(2\times 2~\mu{\rm m}):$ Evolución de la matriz de	
Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	179
B.29. Difusión (medida con el DRCP) por dos grooves de Si $(1\times 1-2~\mu{\rm m}):$ Evolución de la	
matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ)	179

Índice de tablas

2.1.	Representación matricial de sistemas ópticos	38
3.1.	Aplicación de la condición de Coherencia a dos matrices teóricas	42
4.1.	Bandas de emisión del láser Ar:Kr	63
4.2.	Elipticidades de las láminas retardadoras.	64
4.3.	Matrices de calibrado para los dos detectores en idéntica configuración experimental	65
4.4.	Distancias entre elementos ópticos y diámetro de los mismos (mm)	67
4.5.	Configuraciones para el cálculo de ciclos de Fourier teóricos	75
4.6.	Medidas de sistemas ópticos en transmisión	83
4.7.	Medidas en vacío no consecutivas del DRCP.	83
5.1.	Valores del parámetro Υ_{R-G} para estructuras de perfil cuadrado	133
5.2.	Tamaños de las partículas depositadas sobre substrato (Au-Au).	140
5.3.	Tamaños de las fibras depositadas sobre substrato (Au-Au)	142

Capítulo 1

Introducción y Objetivo

1.1. Introducción

Nuestra relación con el entorno se basa en la percepción sensorial. Dentro de los sentidos, la vista es el que nos aporta una información más completa de todo lo que nos rodea, incluso de aquello que está a una gran distancia. Si bien el ojo es el instrumento fundamental para la percepción de esta información, la luz es la información en sí misma y, dadas las características de nuestro sistema visual y la naturaleza de la luz, gran parte de la información permanece oculta (por ejemplo, la referente al estado de polarización o la que se encuentra fuera del espectro visible) haciendo necesario el uso de sistemas de detección específicos.

La complejidad de la luz se pone de manifiesto al observar que su naturaleza ha sido fuente de grandes debates científicos y que su descripción completa, actualmente aceptada, no goza siquiera de un siglo de vida. Sin embargo, su estudio es fundamental para conocer el mundo que nos rodea: Ya sea observando la radiación emergente de astros lejanos en el universo, o recorriendo grutas con candiles o linternas, la luz ha sido una de las herramientas imprescindibles en la exploración de nuestro entorno.

La posibilidad de observar y analizar sistemas de forma no invasiva y en su entorno habitual (observación *in-vivo*) es, con toda seguridad, una de las aplicaciones fundamentales de la luz a nivel científico-tecnológico. En este aspecto, el conocimiento de su naturaleza, como radiación electromagnética, y de las propiedades de la fuente luminosa con la que exploramos dichos sistemas, nos permite determinar el comportamiento de estos a partir de las propiedades de la radiación luminosa emergente de los mismos. Desde el momento en que la luz es formulada como una onda transversal, la orientación del campo asociado a esa onda se convierte en una de sus características principales, a la que nos referimos, de forma general, con el término *polarización* [1, 2, 3]. Si caracterizamos completamente la luz que incide sobre un sistema, y también la que emerge del mismo, conseguiremos toda la información referente al comportamiento de ese sistema para esa frecuencia y esa incidencia. A esta forma de caracterizar un sistema la denominamos polarimetría, aunque este término es tan general que abarca casi cualquier estudio relativo a la polarización de la luz.

Este planteamiento "directo" de la caracterización de sistemas tiene una motivación más profunda que la del conocimiento académico: Observando distintas muestras podemos obtener patrones del comportamiento de las mismas, lo cual es fundamental para abordar el "problema inverso", es decir, a partir del comportamiento de una muestra desconocida ser capaces de determinar su naturaleza, propiedades ópticas y composición. Este es el punto de partida de la polarimetría: Interpretar la información obtenida del análisis polarimétrico de la luz emergente de un medio.

En los últimos veinte años, el interés de muchos investigadores se ha dirigido hacia técnicas de caracterización no invasivas, basadas en el análisis de la luz difundida por los sistemas bajo estudio. Entre ellos cabe destacar la observación de partículas, aisladas o sobre sustratos, y también libres o como parte de sistemas agregados. Desde que la difusión de luz por cilindros o esferas fue resuelta de forma analítica por Mie [4], la teoría de la difusión por partículas regulares o irregulares ha sido desarrollada ampliamente por muchos autores [5, 6, 7], que han construido potentes herramientas de cálculo. Éstas tienen la capacidad de encontrar soluciones aproximadas, basadas en soluciones exactas, del problema electromagnético en cuestión. Como ejemplos, cabe citar el DDA [8], el T-Matrix [9], el

Teorema de Extinción [10] o el FDTD [11], los cuales se describirán brevemente en la sección 2.2.

Existen variados métodos experimentales para el análisis de la luz difundida que, en la mayor parte de los casos, son complementarios. Así, es interesante citar las técnicas estadísticas, tanto en el dominio del tiempo (*Dynamic Light Scattering* o DLS) como en el del espacio (correlaciones espaciales o angulares, *speckle*), o las geometrías especiales (*Total Integrated Scattering* o TIS, *backscattering*, etc.). En relación a las propiedades electromagnéticas de la luz, la medida de la intensidad difundida en combinación con el estado de polarización de la misma, constituye una forma habitual de trabajo. Además, debemos recordar que estos métodos se complementan con el estudio de la respuesta espectral para cada longitud de onda incidente.

Desde el punto de vista experimental, la configuración geométrica puede ayudar a obtener unos observables que se relacionen más fácilmente con las propiedades intrínsecas de los sistemas. Determinadas configuraciones merecen, en general, especial atención: Las medidas en difusión hacia adelante o en retrodifusión [12, 13] pueden ayudar a obtener unos parámetros de gran interés en determinado momento, mientras que, para ciertos tipos de sistemas en la nanoescala [14], la medida a 90^0 aporta gran información sobre los mismos.

Resulta de gran ayuda a estos experimentos el uso de herramientas computacionales, como las citadas anteriormente, que intentan predecir el comportamiento de determinados sistemas antes de su medida experimental, permiten seleccionar la configuración idónea y ayudan a explicar los resultados experimentales [15]. Si a este tipo de herramientas computacionales, le añadimos otra algebraica que ayuda al tratamiento de resultados, como es el método de Descomposición Polar (PD) aplicado a las matrices de Mueller [16], conseguimos que el trabajo de laboratorio se vea, por un lado, respaldado por los resultados teóricos, y por otro, eficientemente analizado.

En la actualidad, la polarimetría, que permite obtener toda la información relativa a la polarización de la luz incidente y emergente de los sistemas, es una herramienta extendida en multitud de campos científicos, y algunas de sus aplicaciones son:

- Industria y metrología óptica: Caracterización de componentes ópticos y microelectrónicos [17, 18, 19, 20, 21], análisis de componentes ópticos [22], diseño y fabricación de componentes [23], etc.
- Radar e Imagen: Polarimetría de imagen [24, 25, 26] y aplicaciones Radar [27], como control remoto, observación de terrenos (vegetación, humedad, arenales, glaciares,...), modelado y meteorología, etc.
- Medicina y biología [28, 29]: Estudio y caracterización de tejidos biológicos [30, 31], tomografía óptica, oftalmología [32, 33, 34], detección de tejidos infartados o cancerosos [35], etc.
- Fibras ópticas y cristales fotónicos [36]: Sistemas de comunicación, control y caracterización de los modos de dispersión, sensores, etc.
- Difusión de luz por sistemas [6, 7]: Fenómenos atmosféricos y aerosoles [37], rugosidad y caracterización de superficies [38], determinación de propiedades ópticas y tamaños de partículas (*particle-sizing*) [39, 40, 41, 42] en contaminantes, microorganismos, etc.
- Investigación en óptica cuántica [43, 44]: Computación cuántica y criptología.
- Multicapas y películas delgadas (*Thin Films*) [45, 46, 47].
- Astrofísica [48, 49]: Polarimetría de Rayos-X y solar, análisis del polvo estelar y de atmósferas planetarias, experimentación bajo condiciones de microgravedad [50], etc.

Con frecuencia, estos campos se solapan y combinan.

1.2. Objetivo de la Tesis

Teniendo en cuenta lo expuesto con anterioridad, el objeto de la presente memoria consiste en el estudio polarimétrico de la luz difundida por sistemas microestructurados sobre substrato y por partículas en suspensión, aplicando el PD al tratamiento de las matrices de Mueller resultantes, de forma que se pueda obtener un avance en la resolución del problema inverso. Para llevar a cabo la realización de medidas polarimétricas experimentales y el tratamiento de los resultados con nuevos algoritmos que permitan procesar la información obtenida, ha sido necesario cumplir cuatro objetivos principales que se enumeran a continuación:

- 1. Poner en marcha un dispositivo polarimétrico eficiente que permita la medida experimental de muestras difusoras, expresando la información en un formato convencional, como es la matriz de Mueller.
- 2. Disponer de métodos de cálculo capaces de simular matrices de Mueller cuando el cálculo analítico no sea posible.
- 3. Diseñar una herramienta matemática que permita transformar la información polarimétrica de la matriz de Mueller (4×4) en una información cuyos parámetros estén más cercanos a la física de los sistemas.
- 4. Desarrollar estudios y casuística que permitan encontrar patrones de comportamiento, predecir geometrías, composición y/o propiedades, de forma que ahondemos en el problema inverso.

A lo largo de la presente memoria se ha seguido el siguiente esquema:

- Una introducción teórica sobre la interacción de la luz con la materia, las propiedades de la luz (entre ellas la polarización), la información que se puede obtener de ella y de los sistemas difusores a partir de la polarización de la misma, los métodos de simulación de difusión de luz por sistemas y, brevemente, sobre los distintos dispositivos experimentales utilizados.
- Una exposición de las bases teóricas del PD: Las distintas variables que toman parte, la despolarización de la luz y los tipos de PD existentes. Además, se mostrará la aplicación del PD en distintas simulaciones de sistemas difusores, comprobando su validez, y dejando la herramienta lista para el análisis de experimentos reales.
- Una descripción del dispositivo experimental polarimétrico, que merece una exposición detenida de su diseño y puesta en marcha. Se detallarán las pruebas a las que fue sometido para comprobar su correcto funcionamiento. En esta sección se describirá también la metodología de preparación de muestras.
- Un capítulo de resultados, acompañados de su análisis y comentario, para un conjunto de sistemas reales:
 - Muestras planas microestructuradas
 - Soluciones coloidales de nanopartículas metálicas
 - Superficies con depósitos de partículas y fibras.
 - Metrología y caracterización de componentes polarimétricos.
- En la sección final de esta memoria, se detalla un resumen de las conclusiones principales, así como las perspectivas futuras de este trabajo.
- Por último, para facilitar la lectura de la memoria, han sido incluidos dos apéndices: Uno de ellos con el tratamiento matemático de los datos del dispositivo polarimétrico, y otro con la serie de figuras resultantes del análisis polarimétrico de gran cantidad de sistemas microestructurados, que no podían ser ubicados en el capítulo de resultados.

Capítulo 2

Difusión de la Luz por Micro- y Nano-Estructuras

La visión del mundo que nos rodea está gobernada inevitablemente por un fenómeno al que, con frecuencia, nos referimos por su término anglosajón *Scattering*, ya que el término en castellano, difusión, es ambiguo en su uso científico. A pesar de esto, a lo largo de esta exposición ambos términos serán utilizados indistintamente. Ya sea de una forma cuantitativa o cualitativa, por medio de modelos físico-matemáticos o mediante nuestras impresiones sensoriales, describir la luz y su obligada interacción con la materia de nuestro entorno necesita de la introducción del concepto de difusión. Tal concepto implica una redistribución espacial de la energía y la aparición de luz en direcciones diferentes a las de emisión de la fuente luminosa, las cuales son típicamente radiales, para fuentes extensas, o lineales, para fuentes direccionales. Este mecanismo, al que estamos tan acostumbrados, unido al de absorción, es el responsable de procesos tan diversos como la diferente irisación de los distintos tipos de nubes, la generación del arco-iris, el color azul del cielo, las puestas de sol anaranjadas o el verde intenso del follaje en los grandes bosques o en la selva.

El estudio genérico de la difusión de la luz dentro de la Óptica ha sido abordado por muchos autores, porque es básico y, por tanto, muy importante [6, 5]. Puesto que se trata de un vasto campo de trabajo, es normal que los procesos de difusión de luz sean estudiados comenzando con sistemas sencillos, a partir de los cuales se puedan ir estableciendo las reglas generales y los modelos matemáticos que permitan incrementar la complejidad. Atrás queda la solución de Mie [4] para el modelo de difusión de luz por una partícula esférica aislada, que es, no obstante, el punto de partida de cualquier estudio que se pretenda realizar en torno al scattering.

Antes de comenzar a analizar el problema de la difusión de la luz y sus soluciones para unas determinadas configuraciones del difusor, es necesario describir la naturaleza de la luz desde un formalismo apropiado, lo que venimos a llamar *Electromagnetismo*. Esta disciplina suministra el aparato físico y matemático que ayudará a desarrollar los siguientes apartados. Es por esto que, en este capítulo, presentaremos un resúmen de los conceptos básicos y de las ecuaciones más vinculadas a la resolución del fenómeno de la difusión de la luz por sistemas sencillos. En el último apartado se resumen las magnitudes polarimétricas de más interés para el desarrollo de esta tesis doctoral.

2.1. Fundamentos de la Teoría Electromagnética

2.1.1. Ecuaciones de Maxwell y Campos Armónicos

En lo que sigue, se adoptará una visión macroscópica del problema de la difusión de luz por partículas. Por lo tanto, el punto de partida para abordar el problema son las *ecuaciones de Maxwell* [51] para el campo electromagnético macroscópico. Considerando que **E** es el campo eléctrico, **B** la inducción magnética, **D** es el desplazamiento eléctrico y **H** el campo magnético [52]. Las ecuaciones de Maxwell en el Sistema Internacional se resumen como:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J}$$
(2.1)

Estas ecuaciones se complementarán con las siguientes, que unen la causa (\mathbf{E},\mathbf{H}) con el efecto (\mathbf{D},\mathbf{B}) a través de la interacción de la luz con el medio en el que se propaga:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}$$
 (2.2)

En la ec. 2.2, **P** es la polarización eléctrica (momento dipolar eléctrico medio por unidad de volumen), **M** es la magnetización (momento dipolar magnético medio por unidad de volumen), y ϵ_0 y μ_0 son la permitividad y permeabilidad del vacío, respectivamente. Se denomina ρ a la densidad de carga y **J** a la densidad de corriente. Ambas magnitudes están asociadas a las comúnmente denominadas cargas libres.

Las anteriores ecuaciones no son suficientes por sí mismas, es necesario completarlas con las *relaciones de constitución* del campo electromagnético, que están referidas a las propiedades del medio por el que se está propagando la luz:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}
 \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}
 \mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}$$
(2.3)

donde σ es la conductividad del medio, μ es su permeabilidad magnética, y χ su susceptibilidad eléctrica. A pesar de que estos *coeficientes fenomenológicos* dependen del medio en consideración, podemos suponer que son independientes de los campos (medio lineal), de la posición (medio homogéneo) y de la orientación de los vectores de campo (medio isótropo). Afortunadamente, una gran cantidad de materiales cumplen estas premisas. No obstante, estos coeficientes no son, por norma general, independientes de la frecuencia (ω) ya que todos los materiales son, en mayor o menor medida, dispersivos [6].

Una posible solución a la ecuación de ondas (2.2) utilizada por su relativa sencillez, es la solución armónica:

$$\mathbf{E} = E \cdot \exp\{(-i\omega t)\} \mathbf{H} = H \cdot \exp\{(-i\omega t)\}$$
(2.4)

Existen dos expresiones para el factor dependiente del tiempo: $\exp\{(-i\omega t)\}$ o $\exp\{(+i\omega t)\}$. No existe diferencia entre ellas en lo que a cantidades de interés físico se refiere, por lo que se ha tomado el convenio de signo negativo, sugerido en varias referencias [53]. Aunque la elección es arbitraria, es necesario respetar el criterio tomado, ya que de otro modo se alcanzarían resultados inconsistentes.

Asumiendo la dependencia temporal armónica, y haciendo uso de las relaciones de constitución, las ecuaciones de Maxwell se escriben:

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E}$$

(2.5)

donde se ha hecho uso de la permitividad compleja, definida como:

$$\epsilon = \epsilon_0 (1 + \chi) + i \frac{\sigma}{\mu} \tag{2.6}$$

Cualquier combinación (\mathbf{E},\mathbf{H}) que verifique las ecs. 2.5, es una onda electromagnética propagante y, como tal, transporta energía. El flujo de esta energía viene determinado por el conocido vector de *Poynting*, cuya expresión viene dada por:

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \tag{2.7}$$

La media temporal del vector de Poynting para campos armónicos está ligada a la irradiancia, y se expresaría como:

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} Re \{ \mathbf{E} \times \mathbf{H}^* \}$$
(2.8)

2.1.2. Propagación de Ondas Planas

Hasta el momento se ha descrito sólo el formalismo matemático del comportamiento temporal del campo electromagnético en un medio cualquiera, sin explicar cómo realiza su propagación a través del medio en cuestión. Sólo determinados campos electromagnéticos, aquellos que satisfacen las ecuaciones de Maxwell, corresponden a una realidad física. Habitualmente son utilizadas las ondas electromagnéticas planas para expresar la propagación del campo electromagnético. Representan bien la radiación de una fuente distante y, además, cualquier onda se puede descomponer como suma de ondas planas. Una onda plana se puede expresar, si consideramos E_0 y H_0 vectores constantes, compatibles con las ecuaciones de Maxwell, de la forma siguiente:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{0} \cdot \exp\{(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)\}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{0} \cdot \exp\{(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)\}$$
(2.9)

donde **r** es el vector de posición respecto al origen del sistema de coordenadas y el vector de onda $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$ es complejo en el caso más general, con \mathbf{k}' y \mathbf{k}'' vectores reales. De esta forma, operando en la ec. 2.9 obtenemos la siguiente expresión para el campo electromagnético:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathbf{0}} \cdot \exp\{-(\mathbf{k}''\mathbf{r})\} \cdot \exp\{(i\mathbf{k}'\mathbf{r} - i\omega t)\}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\mathbf{0}} \cdot \exp\{-(\mathbf{k}''\mathbf{r})\} \cdot \exp\{(i\mathbf{k}'\mathbf{r} - i\omega t)\}$$
(2.10)

siendo $\mathbf{E}_{0} \cdot \exp\{-(\mathbf{k}''\mathbf{x})\}$ y $\mathbf{H}_{0} \cdot \exp\{-(\mathbf{k}''\mathbf{r})\}$ las amplitudes de las ondas eléctricas y magnéticas, respectivamente, y ($\phi = \mathbf{k}'\mathbf{r} - i\omega t$) la fase de las mismas. Dado que, para cualquier vector real \mathbf{K} , la relación $\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} = Constante$ define una superficie plana perpendicular a \mathbf{K} , es inmediato ver que \mathbf{k}' es perpendicular a las superficies de fase constante y \mathbf{k}'' lo es a las superficies de amplitud constante. Si ambos son vectores paralelos o $\mathbf{k}'' = 0$, ambos tipos de superficie coinciden y las ondas son homogéneas. En caso de que ambas componentes del vector de onda no sean paralelas, estaremos hablando de ondas inhomogéneas. La velocidad de propagación de las superficies de fase constante, la velocidad de fase, es $v = \frac{\omega}{\mathbf{k}'}$. Se denomina número de onda a \mathbf{k}' , y se ha definido como $\mathbf{k}' = \mathbf{k}' \cdot \mathbf{u}$ siendo \mathbf{u} el vector unitario en la dirección de propagación.

Las ecuaciones de Maxwell para ondas planas dan como resultado:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_{0} = 0$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{H}_{0} = 0$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E}_{0} = \omega \mu \mathbf{H}_{0}$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H}_{0} = -\omega \epsilon \mathbf{E}_{0}$$

(2.11)

Las dos primeras igualdades son las condiciones de *transversalidad*, es decir, \mathbf{k} y \mathbf{E}_0 son ortogonales, de igual modo que \mathbf{k} y \mathbf{H}_0 . Las siguientes muestran que \mathbf{E}_0 y \mathbf{H}_0 también son ortogonales. No obstante, los tres vectores son, en general, complejos, por lo que su interpretación no es evidente, salvo que las ondas a considerar sean homogéneas. En tal caso, los campos reales \mathbf{E} y \mathbf{H} permanecerán en un plano perpendicular a la dirección de propagación, y serían perpendiculares entre sí. Existen ondas en las cuales no se cumple la condición de homogeneidad como, por ejemplo, las ondas evanescentes, que son ondas planas locales inhomogéneas, de fase compleja, que se propagan en medios sin pérdidas [54].

Las ondas evanescentes se propagan a lo largo del plano definido por la superficie del material y, al mismo tiempo, se atenúan en la dirección normal a la superficie [55].

Operando en la tercera igualdad se puede ver que:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = \omega^2 \epsilon \mu \iff \mathbf{k'}^2 - \mathbf{k''}^2 + 2i\mathbf{k'} \cdot \mathbf{k'} = \omega^2 \epsilon \mu$$
(2.12)

expresión particularmente interesante porque relaciona las propiedades ópticas del medio ($\epsilon \ y \ \mu$) con propiedades de la onda que lo atraviesa (a la izquierda de la ecuación). Podemos escribir el vector de onda como $\mathbf{k} = (\mathbf{k}' + i\mathbf{k}'')\mathbf{u}$, donde $\mathbf{k}' \ y \ \mathbf{k}''$ son reales positivos y \mathbf{u} es un vector real unitario en la dirección de propagación. De esta forma, si c es la velocidad de la luz en el vacío y N es el *índice de refracción complejo* del medio, la ec. 2.12 impone que:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}'' = \frac{\omega N}{c}$$

$$N = c\sqrt{\epsilon\mu} = \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{\epsilon_0\mu_0}}$$

$$N = n + ik$$
(2.13)

siendo n y k las partes real e imaginaria del índice de refracción, ambos reales positivos. El número de onda en el espacio libre, considerando λ la longitud de onda en el vacío, se define como $\frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$. Con esta notación, la parte eléctrica de una onda plana homogénea toma la forma (el término **E** puede ser sustituido por **H** para obtener la parte magnética):

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathbf{0}} \cdot \exp\{-\left(\frac{2\pi kz}{\lambda}\right)\} \cdot \exp\{\left(i\frac{2\pi nz}{\lambda} - i\omega t\right)\}$$
(2.14)

con $z = \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}$, si escogemos el eje Z como dirección de propagación de la onda.

La ec. 2.14 introduce la conclusión más interesante que se buscaba con esta parte de la memoria: Las constantes ópticas $n \ge k$ determinan la velocidad de fase de la onda en el medio $v = \frac{c}{n}$, y su atenuación al propagarse, respectivamente.

Antes de pasar al siguiente punto, indagaremos un poco en el problema de la absorción. El vector de Poynting de una onda plana es:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} Re \left\{ \mathbf{E} \times \mathbf{H}^* \right\} = Re \left\{ \frac{\mathbf{k}^* (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^*)}{2\omega \mu^*} \right\}$$
(2.15)

donde se ha supuesto que la onda es homogénea. Con lo cual, para una onda propagándose en la dirección \mathbf{u}

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} Re \left\{ \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \right\} |\mathbf{E}_{\mathbf{0}}|^2 \exp\{-\left(\frac{4\pi kz}{\lambda}\right)\} \mathbf{u}$$
(2.16)

resultando \mathbf{S} en la dirección de propagación. El módulo del vector de Poynting, promediado temporalmente, es la *irradiancia I*, o cantidad de energía que atraviesa el medio por unidad de área y tiempo. Cuando una onda homogénea atraviesa un medio, la irradiancia es atenuada exponencialmente. Dicha atenuación viene dada por el *coeficiente de absorción* característico del medio:

$$I = I_0 e^{-\alpha z} \implies \alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \tag{2.17}$$

Hemos considerado que el medio material por el que se transmite la onda electromagnética es homogéneo, suposición correcta en primera aproximación. Aun así, en los medios considerados como no homogéneos, la atenuación de un impulso luminoso se debe tanto a la absorción como a la difusión.

2.1.3. Reflexión y Transmisión

Consideremos la incidencia de una onda electromagnética sobre la superficie plana que separa dos medios. Esta situación, aparentemente simple, es de gran ayuda al desarrollo de esta memoria, ya que el análisis polarimétrico de la reflexión y la transmisión será utilizado como prueba para evaluar el correcto funcionamiento del dispositivo experimental. Además de esto, los resultados que se obtienen al imponer las condiciones de contorno de este problema ilustran la forma de trabajo de algunos de los métodos más comunes para el análisis de los problemas de difusión por partículas pequeñas (por ejemplo el *MDIM*, del que se hablará en la sección 2.2.2).



Figura 2.1: Esquema de la reflexión y transmisión de una onda electromagnética con el vector eléctrico paralelo (flecha) o perpendicular (punto) al plano de incidencia

Incidencia normal

Sea una onda plana propagándose a través de un medio no absorbente de índice de refracción $N_2 = n_2$, que incide sobre un medio cuyo índice de refracción es $N_1 = n_1 + ik_1$, separado del primero por una interfase plana (fig. 2.1). Denotaremos el campo incidente por \mathbf{E}_i , y los campos transmitido y reflejado por \mathbf{E}_t y \mathbf{E}_r , respectivamente. Las soluciones a las ecuaciones de Maxwell para $\Theta_i = 0$ en ambos lados de la interfase son:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{\mathbf{t}} \cdot \exp\{i\omega(\frac{N_{1}z}{c}-t)\} & (z>0) \\ \mathbf{E}_{\mathbf{i}} \cdot \exp\{i\omega(\frac{N_{2}z}{c}-t)\} + \mathbf{E}_{\mathbf{r}} \cdot \exp\{-i\omega(\frac{N_{2}z}{c}-t)\} & (z<0), \end{cases}$$
(2.18)

La continuidad de las componentes tangenciales del campo eléctrico a lo largo de z = 0 implica, para el caso de incidencia normal, que:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{i}} + \mathbf{E}_{\mathbf{r}} = \mathbf{E}_{\mathbf{t}} \tag{2.19}$$

y para las componentes tangenciales del campo magnético se ha de cumplir:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{i}} - \mathbf{E}_{\mathbf{r}} = \frac{N_1}{N_2} \mathbf{E}_{\mathbf{t}}$$
(2.20)

donde hemos usado la ec. 2.11 y hemos supuesto $\mu_1 = \mu_2 = 1$. La solución de ambas ecuaciones es:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{\mathbf{r}} = \widetilde{r} \, \mathbf{E}_{\mathbf{i}} \implies \widetilde{r} = \frac{1-m}{1+m} \\ \mathbf{E}_{\mathbf{t}} = \widetilde{t} \, \mathbf{E}_{\mathbf{i}} \implies \widetilde{t} = \frac{2}{1+m} \end{cases}$$
(2.21)

siendo \tilde{r} y \tilde{t} los coeficientes de reflexión y transmisión, respectivamente, y $\frac{N_1}{N_2} = m = n + ik$ el índice de refracción relativo entre medios. La *Reflectancia* R a incidencia normal, definida como la relación entre la irradiancia incidente y la reflejada, es

$$R = |\tilde{r}|^2 = \left|\frac{1-m}{1+m}\right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$$
(2.22)

Curiosamente R es cercano al 100 % tanto si $n \gg 1$, $n \ll 1$ o $k \gg 1$, ya que, aunque el material sea altamente absorbente, su alta Reflectancia impide que la onda se introduzca en éste.

Incidencia oblicua

Todas las ondas planas, que inciden normalmente sobre una interfase plana entre dos medios, son reflejadas y transmitidas de acuerdo con la ec. 2.21 independientemente de su estado de polarización (orientación de \mathbf{E}_{i}), ya que no hay nada que rompa la simetría de revolución en torno a la dirección de propagación y, supuesta una interfase plana perfecta, tampoco habría luz en otras direcciones. Esta situación es análoga, como se verá, a la difusión de la luz hacia delante (0°) o hacia atrás (180°) por una esfera isótropa o por una colección de partículas orientadas de forma aleatoria, direcciones para las cuales cualquier orientación de la onda incidente se resuelve de forma similar. Cuando hay luz fuera de esas direcciones, se puede definir un plano de difusión respecto del cual cada polarización se comporta de un modo diferente. Algo parecido ocurre cuando la incidencia sobre la interfase plana es oblicua, ya que la dirección de incidencia y la normal determinan el plano de incidencia que, de nuevo, rompe la simetría. Entonces la polarización de la onda incidente es realmente importante (Los conceptos relativos a la difusión y polarización serán tratados con más profundidad en las secciones 2.2 y 2.3). Si la luz incidente no está polarizada, la luz reflejada o transmitida por la interfase puede estarlo parcial o totalmente. Para tratar la reflexión consideraremos dos estados de polarización, uno paralelo (Onda P) y otro perpendicular (Onda S) al plano de incidencia (fig. 2.1), determinado por la dirección de propagación de la onda incidente y la dirección normal a la interfase. Cualquier onda puede ser expresada como combinación de ambos estados, que además son independientes: Si la onda incidente es tipo S (respectivamente P) las ondas reflejada y transmitida son del tipo S (respectivamente P).

Consideremos el campo eléctrico incidente tipo P. Por la continuidad de las componentes tangenciales del campo eléctrico, se debe cumplir:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{\mathbf{Pi}} \cos \Theta_i + \mathbf{E}_{\mathbf{Pr}} \cos \Theta_r = \mathbf{E}_{\mathbf{Pt}} \cos \Theta_t \\ \mathbf{E}_{\mathbf{Pi}} - \mathbf{E}_{\mathbf{Pr}} = \frac{N_1}{N_2} \mathbf{E}_{\mathbf{Pt}} \end{cases}$$
(2.23)

En reflexión $\Theta_i = \Theta_r$ y, en primera aproximación, para la refracción:

$$\sin \Theta_t = \frac{\sin \Theta_i}{m} \tag{2.24}$$

En general, la relación entre Θ_t y las propiedades geométricas de la onda transmitida para medios con índice complejo produce ondas inhomogéneas que no son de aplicación para los objetivos de esta memoria. Los coeficientes de reflexión y transmisión obtenidos a partir de las ecs. 2.23 y 2.24, son:

$$\begin{cases} \widetilde{r}_P = \frac{E_{Pr}}{E_{Pi}} = \frac{\cos\Theta_t - m\cos\Theta_i}{\cos\Theta_t + m\cos\Theta_i} \\ \widetilde{t}_P = \frac{E_{Pt}}{E_{Pi}} = \frac{2\cos\Theta_i}{\cos\Theta_t + m\cos\Theta_i} \end{cases}$$
(2.25)

Realizando un análisis semejante con la componente perpendicular del campo eléctrico, los coeficientes de reflexión y transmisión resultan ser:

$$\begin{cases} \widetilde{r}_{S} = \frac{E_{Sr}}{E_{Si}} = \frac{\cos\Theta_{i} - m\cos\Theta_{t}}{\cos\Theta_{i} + m\cos\Theta_{t}} \\ \widetilde{t}_{S} = \frac{E_{St}}{E_{Si}} = \frac{2\cos\Theta_{i}}{\cos\Theta_{i} + m\cos\Theta_{t}} \end{cases}$$
(2.26)

Las ecs. 2.25 y 2.26 son las Fórmulas de Fresnel para la reflexión y transmisión de la luz en una interfase plana. La Reflectancia R o factor de reflexión es una magnitud relativamente sencilla de medir o simular para cada tipo de polarización, y representa el cociente de energía reflejada en la interfase. Se puede obtener de forma específica para la onda incidente tipo S y P, o, de forma general, para luz incidente despolarizada:

$$R_P = |\tilde{r}_P|^2, \ R_S = |\tilde{r}_S|^2 \ o \ R = \frac{1}{2}(R_P + R_S)$$
 (2.27)



Figura 2.2: Cálculos de reflectancias para incidencia con polarización paralela (p), perpendicular (s) y despolarizada (t), en función del ángulo de incidencia. Ejemplos de Agua pura y Oro a distintas longitudes de onda.

En la fig. 2.2 se expone la evolución angular de las reflectancias para el paso desde el vacío al Agua $(n_{633} \simeq 1,330)$ y al Oro $(m_{633} = 0,197 + 3,0908i, m_{521} = 0,567 + 2,2026i)$ [56]. Para la situación particular de la interfase plana entre el vacío $(N_2 = 1)$ y cualquier otro medio continuo, se pueden encontrar dos situaciones que más adelante serán usadas para probar el dispositivo experimental (con la salvedad de incidir desde el aire, en lugar del vacío):

1. Para una onda que circula por el vacío e incide sobre un medio que no presente absorción $(N_1 = n), R_P \neq 0$ siempre, pero existe un ángulo de incidencia en el cual $R_P = 0$. Para este ángulo, ángulo de Brewster, la componente reflejada está totalmente polarizada en dirección perpendicular al plano de incidencia, a partir de la ecuación 2.25 se puede ver que:

$$\tan \Theta_B = n \tag{2.28}$$

2. Si, por contra, la superficie que atraviesa la onda plana tiene un índice superior al del medio sobre el que incide, a partir de la ley de Snell se puede ver que (suponiendo, en este caso, ambos medios no absorbentes):

$$\sin\Theta_t = \frac{n_2}{n_1}\sin\Theta_i \tag{2.29}$$

encontrando que, para un $n_2 \ge n_1$, existe un $\Theta_i = \arcsin\left(\frac{n_1}{n_2}\right)$ (denominado ángulo límite o ángulo crítico) entre 0 y $\frac{\pi}{2}$ para el cual $\Theta_t = \frac{\pi}{2}$ y, a partir del cual, al aplicar la Ley de Snell se obtendría $\sin \Theta_t \ge 1$, solución que resulta no ser real. Esta circunstancia especial, denominada reflexión total, se caracteriza porque la onda incidente es totalmente reflejada $\tilde{t} = 0$, como se puede ver en la fig. 2.3 para el Vidrio BK7 ($n_{633} = 1,51509$) [56].

2.2. Difusión de luz por Estructuras

Cuando una partícula es iluminada por un haz de unas características conocidas, la cantidad total de luz difundida, sus propiedades polarimétricas y la distribución angular de ésta dependen, de forma unívoca, de la composición, forma y tamaño de la partícula. A pesar de que de esta afirmación surgen una amplia variabilidad de combinaciones y resultados, existen una serie de comportamientos comunes a todos los procesos de difusión de la luz por partículas, los cuales nos permiten abordar de una forma exitosa el gran reto de la resolución del problema inverso. Salvo que sea necesario para evitar la exposición errónea de algún concepto, en los razonamientos sucesivos se hará referencia únicamente al campo eléctrico. Se entiende que el campo magnético cumple las mismas condiciones y queda unívocamente determinado a partir de aquel, sin aportar una información útil en materiales considerados como "no magnéticos" ($\mu = 1$), lo cual es típico en el rango visible, donde vamos a trabajar.



Figura 2.3: Cálculo de reflectancias en función del ángulo de incidencia: Reflexión total para el Vidrio BK7.

2.2.1. Difusión por una Partícula Aislada en un Medio Homogéneo

Supongamos una partícula aislada, de un determinado tamaño, composición y forma, que es iluminada por un haz monocromático con una polarización dada, vamos a determinar el campo electromagnético dentro de ésta y el campo difundido por ella en cualquier punto del medio que la rodea. El problema se puede abordar partiendo de la ec. 2.5, de la cual se desprende la *ecuación de onda* para el vector eléctrico que, para un medio lineal, homogéneo y libre de fuentes, es:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0 \tag{2.30}$$

donde $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$ y $\nabla^2 \mathbf{E} = \nabla \cdot (\nabla \mathbf{E}).$



(a) Diagrama de contribuciones del campo.



Figura 2.4: Representaciones gráficas del problema de difusión por una partícula.

Como se indica en la fig. 2.4(a), denominando $\mathbf{E_1}$ al campo eléctrico en el interior de la partícula, $\mathbf{E_2} = \mathbf{E_i} + \mathbf{E_{sca}}$ al campo eléctrico en el medio que la rodea, $\mathbf{E_i}$ al campo eléctrico incidente y $\mathbf{E_{sca}}$ al campo eléctrico difundido por la partícula, la condición de contorno para que la componente tangencial de \mathbf{E} sea continua a lo largo de la superficie S es:

$$[\mathbf{E}_2(\mathbf{x}) - \mathbf{E}_1(\mathbf{x})] \times \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{x} \in S$$
(2.31)

siendo **n** el vector unitario normal a la superficie con dirección hacia el exterior. Como se puede ver en las referencias [6], la anterior relación es condición necesaria y suficiente para la conservación de la energía a través de la superficie, con lo cual, el problema se reduce a construir una solución a las ecuaciones de Maxwell (2.5) que verifique las condiciones de contorno (2.31). La solución al problema de interacción entre un campo electromagnético y una partícula puede ser obtenida mediante la superposición de soluciones fundamentales, como consecuencia de la linealidad de las ecuaciones de Maxwell y de las condiciones de contorno. Esto justifica el uso de ondas monocromáticas planas [57]. Además, dado que una onda electromagnética puede ser expresada como la superposición de dos estados de polarización ortogonales [1], la solución puede ser calculada de forma independiente para ambas componentes ortogonales.

En base a la fig. 2.4(b), la dirección de la luz incidente define el eje Z. La dirección de difusión $\mathbf{e_r}$ y la de incidencia $\mathbf{e_z}$ definen el *plano de scattering*, cuya función es análoga a la que cumplía el plano de incidencia en los problemas de reflexión de la sección 2.1.3. No obstante, en aquellos casos es el medio el que determina el plano, mientras que en los casos de scattering se puede separar el plano de incidencia (determinado por la normal y la dirección de incidencia) y el plano de scattering, que es variable y queda determinado por la dirección de observación y la normal. De modo que el plano de scattering queda determinado de forma unívoca por medio del ángulo acimutal ϕ , salvo cuando ambas direcciones coinciden. El campo incidente $\mathbf{E_i}$ puede descomponerse en la componente paralela al plano de scattering ($\mathbf{E_{Pi}}$) y la perpendicular ($\mathbf{E_{Si}}$), de forma que, si $k = \frac{2\pi N_2}{\lambda}$ es el número de onda en el medio, λ es la longitud de onda para el campo incidente en el vacío y N_2 es el índice de refracción del medio para esa longitud de onda

$$\mathbf{E}_{\mathbf{i}} = (E_{0P}\mathbf{e}_{P\mathbf{i}} + E_{0S}\mathbf{e}_{S\mathbf{i}})\exp(ikz - i\omega t) = E_{Pi}\mathbf{e}_{P\mathbf{i}} + E_{Si}\mathbf{e}_{S\mathbf{i}}$$
(2.32)

con la base de vectores ortonormales:

$$\begin{cases} \mathbf{e}_{\mathbf{Pi}} = \cos\phi \mathbf{e}_{\mathbf{x}} + \sin\phi \mathbf{e}_{\mathbf{y}} \\ \mathbf{e}_{\mathbf{Si}} = \sin\phi \mathbf{e}_{\mathbf{x}} - \cos\phi \mathbf{e}_{\mathbf{y}} \\ \mathbf{e}_{\mathbf{Si}} \times \mathbf{e}_{\mathbf{Pi}} = \mathbf{e}_{\mathbf{z}} \end{cases}$$
(2.33)

Del mismo modo tenemos:

$$\begin{cases} \mathbf{e}_{\mathbf{S}\mathbf{i}} = -\mathbf{e}_{\phi} \\ \mathbf{e}_{\mathbf{P}\mathbf{i}} = \sin\theta\mathbf{e}_{\mathbf{r}} + \cos\theta\mathbf{e}_{\theta} \end{cases}$$
(2.34)

donde $\mathbf{e}_{\mathbf{r}}$, \mathbf{e}_{θ} y \mathbf{e}_{ϕ} es la base ortonormal de vectores asociados al sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) .

En la región de *campo lejano* $(kr \gg 1)$, el campo eléctrico difundido (\mathbf{E}_{sca}) es aproximadamente transversal $(\mathbf{e}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{E}_{sca} \simeq 0)$, con lo cual puede ser escrito como:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{sca} = E_{S,sca} \mathbf{e}_{S,sca} + E_{Ps} \mathbf{e}_{P,sca} \\ \mathbf{e}_{P,sca} = \mathbf{e}_{\theta}, \ \mathbf{e}_{S,sca} = -\mathbf{e}_{\phi}, \ \mathbf{e}_{S,sca} \times \mathbf{e}_{P,sca} = \mathbf{e}_{\mathbf{r}} \end{cases}$$
(2.35)

Debido a la linealidad de las condiciones de contorno (2.31), la amplitud del campo difundido por una partícula es una función lineal de la amplitud del campo incidente, y se puede escribir de forma matricial, usando las relaciones 2.32 y 2.35, como:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\mathbf{P},\mathbf{sca}} \\ \mathbf{E}_{\mathbf{S},\mathbf{sca}} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2(\theta,\phi) & S_3(\theta,\phi) \\ S_4(\theta,\phi) & S_1(\theta,\phi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\mathbf{Pi}} \\ \mathbf{E}_{\mathbf{Si}} \end{pmatrix}$$
(2.36)

siendo denominada como matriz de amplitud de scattering, la matriz compuesta por los elementos S_i .

Difusión por una Esfera:

Cualquier solución para el campo electromagnético debe cumplir las relaciones impuestas por la ec. 2.30, tener divergencia nula y una dependencia entre el campo eléctrico y magnético de acuerdo a la ec. 2.5. A partir de aquí, se puede construir una solución plausible. Imaginemos una esfera de radio a e índice de refracción N_1 , inmersa en un medio de índice de refracción N. Supongamos que, dada una función escalar ψ y un vector constante **c**, construimos el siguiente vector:

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\psi) \tag{2.37}$$

resultando que, como la divergencia del rotacional de cualquier vector es nula,

$$\nabla \cdot \mathbf{M} = 0 \tag{2.38}$$

Sustituyendo **M** en la ecuación de onda (2.30) y aplicando algunas identidades vectoriales, se puede afirmar que **M** cumple la ecuación de onda si y sólo si ψ es una solución de la ecuación de onda escalar:

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0 \tag{2.39}$$

Si construimos una nueva función vectorial $\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k}$, la cual satisface la ecuación de onda y tiene divergencia nula, se cumplirá:

$$\nabla \times \mathbf{N} = k\mathbf{M} \tag{2.40}$$

de forma que **M** y **N** presentan todas las propiedades exigidas a un campo electromagnético: Satisfacen la ecuacion de onda vectorial, presentan divergencia cero y, finalmente, el rotacional de **M** es proporcional a **N**, y viceversa. El problema se reduce, pues, a encontrar soluciones a la ecuación de onda escalar. Es por esto que ψ es denominada función generadora para los vectores armónicos **M** y **N**, y **c** recibe el nombre de vector guía.

Una forma de abordar la solución es mediante el trabajo en coordenadas esféricas. En cuyo caso \mathbf{r} puede ser elegido como vector guía, y la ecuación de onda escalar es:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + k^2\psi = 0$$
(2.41)

la cual, si se usan soluciones del tipo $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi)$, da lugar a tres ecuaciones de variables separadas en las que aparecen dos constantes m = 0, 1, ..., y n = m, m + 1, ..., que son determinadas por las condiciones que la función $\psi(r, \theta, \phi)$ debe satisfacer. Finalmente, las funciones que satisfarían la ecuacion escalar de onda en coordenadas esféricas son:

$$\begin{cases} \psi_{emn} = \cos(m\phi) \cdot P_n^m(\cos\theta) \cdot z_n(kr) \\ \psi_{omn} = \sin(m\phi) \cdot P_n^m(\cos\theta) \cdot z_n(kr) \end{cases}$$
(2.42)

donde z_n es cualquiera de las cuatro funciones de Bessel esféricas $(j_n, y_n, h_n^{(1)} ext{ y } h_n^{(2)}$, éstas dos últimas también denominadas funciones de Hankel), $P_n^m(\cos\theta)$ son las funciones asociadas de Legendre de primer orden, y los subíndices e y o hacen referencia a la paridad (even y odd). Cualquier función que satisfaga la ecuación de ondas escalar en coordenadas esféricas se puede ser expandida en una serie infinita de estas funciones.

Los armónicos esféricos vectoriales (AEV) generados por las funciones ψ_{emn} y ψ_{omn} son:

$$\begin{cases} \mathbf{M}_{emn} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi_{emn}) \\ \mathbf{N}_{emn} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{emn}}{k} \end{cases}, \begin{cases} \mathbf{M}_{omn} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi_{omn}) \\ \mathbf{N}_{omn} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{omn}}{k} \end{cases}$$
(2.43)

Cualquier solución de las ecuaciones de campo puede ser expandida en series infinitas de estas funciones. De este modo, se puede expandir una onda plana en AEV. De acuerdo con la fig. 2.4(b), se puede escribir una onda plana incidente polarizada en x en coordenadas polares como:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{i}} = E_0 \exp\{ikr\cos\theta\}\mathbf{e}_{\mathbf{x}} \tag{2.44}$$

para la cual, la expansión en términos de AEV es:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{i}} = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\mathbf{M}_{\mathbf{oln}}^{(1)} - i \mathbf{N}_{\mathbf{eln}}^{(1)} \right)$$

$$\mathbf{H}_{\mathbf{i}} = \frac{-k}{\omega \mu} E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\mathbf{M}_{\mathbf{eln}}^{(1)} + i \mathbf{N}_{\mathbf{oln}}^{(1)} \right)$$

$$(2.45)$$

Se debe expandir en AEV también el campo en el interior de la partícula $(\mathbf{E_1}, \mathbf{H_1})$ y el difundido $(\mathbf{E_{sca}}, \mathbf{H_{sca}})$. Si se aplican las condiciones de contorno en la superficie de la esfera:

$$(\mathbf{E}_{\mathbf{i}} + \mathbf{E}_{\mathbf{sca}} - \mathbf{E}_{\mathbf{1}}) \times \mathbf{e}_{\mathbf{r}} = (\mathbf{H}_{\mathbf{i}} + \mathbf{H}_{\mathbf{sca}} - \mathbf{H}_{\mathbf{1}}) \times \mathbf{e}_{\mathbf{r}} = 0$$
(2.46)

al unirlas con la ortogonalidad de los AEV y con la forma que adopta la expansión del campo incidente, condicionan la forma de expansión del campo dentro de la esfera:

$$\mathbf{E}_{1} = \sum_{n=1}^{\infty} E_{n} \left(c_{n} \mathbf{M}_{\mathbf{oln}}^{(1)} - i d_{n} \mathbf{N}_{\mathbf{eln}}^{(1)} \right)$$

$$\mathbf{H}_{1} = \frac{-k_{1}}{\omega \mu_{1}} \sum_{n=1}^{\infty} E_{n} \left(d_{n} \mathbf{M}_{\mathbf{eln}}^{(1)} + i c_{n} \mathbf{N}_{\mathbf{oln}}^{(1)} \right)$$
(2.47)

siendo μ_1 la permeabilidad de la esfera y $E_n = E_0 i^n \frac{2n+1}{n(n+1)}$.

La expresión para el campo difundido en aproximación de campo lejano, es:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{\mathbf{sca}} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i a_n \mathbf{N}_{\mathbf{e1n}}^{(\mathbf{3})} - b_n \mathbf{M}_{\mathbf{o1n}}^{(\mathbf{3})} \right) \\ \mathbf{H}_{\mathbf{sca}} = \frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i b_n \mathbf{N}_{\mathbf{o1n}}^{(\mathbf{3})} + a_n \mathbf{M}_{\mathbf{e1n}}^{(\mathbf{3})} \right) \end{cases}$$
(2.48)

donde el índice (3) hace referencia a la dependencia radial de los AEV con la función generadora construida a partir de $h_n^{(1)}$. Las expresiones explícitas para los *coeficientes de difusión* se obtienen en base a la aplicación de las condiciones de contorno (2.46). Por norma general, y en primera aproximación, el campo difundido es una superposición de los modos normales a_n y b_n . Si suponemos que la permeabilidad de la partícula y la del medio son iguales ($\mu = \mu_1$) los coeficientes a_n y b_n se pueden expresar, introduciendo las funciones de Riccati-Bessel $\psi_n(\rho)$ y $\xi_n(\rho)$, como:

$$\begin{cases} \mathbf{a_n} = \frac{m\psi_n(mx)\psi_n(x)' - \psi_n(x)\psi_n(mx)'}{m\psi_n(mx)\xi_n(x)' - \xi_n(x)\psi_n(mx)'} \\ \mathbf{b_n} = \frac{\psi_n(mx)\psi_n(x)' - m\psi_n(x)\psi_n(mx)'}{\psi_n(mx)\xi_n(x)' - m\xi_n(x)\psi_n(mx)'} \end{cases}$$
(2.49)

siendo $x = ka = \frac{2\pi Na}{\lambda}$ el parámetro de tamaño de la esfera, a el radio de la misma y $m = \frac{k_1}{k} = \frac{N_1}{N}$ su índice de refracción relativo.



Figura 2.5: Eficiencias de extinción en función del parámetro de tamaño de la partícula para $\lambda=633$ nm
A partir de los coeficientes de difusión se pueden definir la *sección eficaz de extinción*, la *sección eficaz de difusión* y la *sección eficaz de absorción* que, en términos geométricos, vienen a ser las áreas efectivas que presenta la partícula ante estos fenómenos:

$$\begin{cases} \sigma_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) Re\{a_n + b_n\} \\ \sigma_{sca} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left(|a_n|^2 + |b_n|^2 \right) \end{cases}$$
(2.50)

 $\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{sca}$

cuyas eficiencias $(Q_{ext}, Q_{sca} \neq Q_{abs})$ vendrían dadas por la relación entre estas secciones y el área geométrica real transversal (σ_0) de la partícula (área de su proyección sobre un plano normal a la dirección del haz incidente, e.g. para esferas $\sigma_0 = \pi a^2$). Mientras que las secciones eficaces presentan unidades de área, las correspondientes eficiencias son adimensionales. Estas expresiones, calculadas para un haz de luz con polarización lineal en x son válidas para cualquier haz linealmente polarizado, ya que sólo haría falta volver a interpretar cuál es la dirección x. La tercera ecuación de la expresión 2.50 representa el denominado *teorema óptico*: La extinción es el efecto combinado de la absorción por la partícula y la difusión en el resto de direcciones, y depende únicamente de la amplitud de difusión en la dirección 0^0 [6].

Se puede analizar brevemente la fig. 2.5, calculada a partir de los algoritmos de la referencia [58], en la que se presenta la eficiencia de extinción en función del parámetro de tamaño de la partícula (ka). Se aprecia como, para materiales dieléctricos, la eficiencia aumenta de forma paulatina hasta encontrar un máximo en torno a x = 4,0 para el Vidrio y x = 6,5 para el Agua. Aparece, asimismo, una oscilación de baja frecuencia sobre la cual se superpone una oscilación de más alta frecuencia, *ribeteando* la estructura. La oscilación es denominada *estructura interferencial*, mientras el ribeteado viene impuesto por las resonancias de Mie (efecto de los coeficientes a_n y b_n cuyos denominadores tienden a 0). La estructura del conductor, Oro en este caso, no presenta el mismo patrón, siendo únicamente visibles los picos equiespaciados. En la fig. 2.5 se intuye lo que se ha venido a denominar *paradoja de extinción*, es decir, que $\lim_{x\to\infty} Q_{ext}(x,m) = 2$. La óptica geométrica no es capaz, por sí misma, de explicar esta situación: Un objeto grande no podría extinguir el doble de energía que llega a él. No obstante, un cálculo conjunto de teoría geométrica y difraccional (*difracción de Fraunhofer*) [6] daría como resultado una sección eficaz de extinción $\sigma_{ext} = 2\sigma_0$, dos veces superior a la sección geométrica del objeto, deshaciendo tal paradoja.

Partículas con $r \simeq \lambda$: Difusión de Mie

A pesar de que el cálculo teórico general para esferas fue llevado a cabo por Gustav Mie [4], lo que tradicionalmente se denomina difusión de Mie es la difusión de la luz por partículas cuyo radio es, aproximadamente, del tamaño de la longitud de onda de la luz que incide sobre ella. Esta restricción aparente es debida a que, para tamaños mayores es posible hacer aproximaciones geométricas al problema, y para tamaños menores resulta apropiada una aproximación dipolar (*scattering Rayleigh*). Como ejemplo de este tipo de scattering, muestro en la fig. 2.6 los diagramas de difusión generados para varios parámetros de tamaño de partícula, para Oro y Agua (este último comparable con las gotas atmosféricas), y para polarización incidente paralela y perpendicular.



Figura 2.6: Ejemplos de difusión de Mie para una partícula aislada ($\lambda = 633$ nm). Diagramas polares con escala radial logarítmica para x = 0.5, x = 2 y x = 10

Cabe destacar que, para partículas pequeñas, la componente P a 90⁰ tiende a 0. Las desviaciones de este comportamiento indican, bien un mayor tamaño de las partículas ($x \sim 1$ ó mayor), o bien la aparición de efectos de difusión múltiple, relacionados con la coexistencia de varias partículas vecinas en un entorno cercano (agregados) [59]. Por otro lado, es observable el hecho de que la contribución de la luz difundida hacia atrás (en la zona próxima a los 180⁰ o región de *backscattering*) es mucho menor que en la zona próxima a los 0⁰ (denominada *forward-scattering*). La contribución de backscattering aumenta con el tamaño de la partícula, llegando a ser predominante, lo que sucedería si la partícula alcanzara tamaño suficiente para ser considerada como una superficie en la que el haz se reflejara. La lobulación existente en los diagramas de difusión puede ser utilizada para el cálculo del tamaño de la partícula, como se ha demostrado en distintas referencias [60].

Aunque hasta el momento no se ha hecho referencia al haz incidente, es necesario aclarar que el haz realmente no es infinito como se ha supuesto en todas las situaciones previas. No obstante, si se considera un típico haz gausiano, de un tamaño superior al obstáculo, la hipótesis de un haz ideal plano e infinito es plausible.

Los modelos de cálculo para sistemas Mie se basan en la resolución directa de la teoría de Mie, aplicando la solución recurrente de los coeficientes de difusión mediante las reglas de cálculo y derivación de las funciones de Bessel y Hankel. Esto permite calcular en buena aproximación, con un error conocido en el redondeo del cálculo y dependiente de la cantidad de términos que se estimen, las secciones eficaces y el diagrama de difusión asociados al problema en cuestión.

Partículas Pequeñas ($r \ll \lambda$): Difusión de Rayleigh y Aproximación Electrostática

Para el supuesto de partículas mucho más pequeñas que la longitud de onda, es necesario ir un poco más allá en la teoría de Mie. La expansión de las funciones de Bessel en serie de potencias, cortando en los términos de orden x^6 y suponiendo $\mu_1 = \mu$, da lugar a los siguientes coeficientes para

los modos TE (a_i) y TM (b_i) :

$$\begin{cases} a_{1} = -\frac{i2x^{3}}{3} \frac{m^{2} - 1}{m^{2} + 2} - \frac{i2x^{5}}{5} \frac{(m^{2} - 2)(m^{2} - 1)}{(m^{2} + 2)^{2}} + \frac{4x^{6}}{9} \frac{(m^{2} - 1)^{2}}{(m^{2} + 2)^{2}} + O(x^{7}) \\ b_{1} = -\frac{ix^{5}}{45} (m^{2} - 1) + O(x^{7}) \\ a_{2} = -\frac{ix^{5}}{15} \frac{m^{2} - 1}{2m^{2} + 3} + O(x^{7}) \\ b_{2} = +O(x^{7}) \end{cases}$$

$$(2.51)$$

A partir de esta relación, suponiendo partículas pequeñas ($|m|x \ll 1$), tenemos que $|b_1| \ll a_1$, con lo cual el modo TE es dominante, y para términos de orden x^3 :

$$a_1 = -\frac{i2x^3}{3}\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \tag{2.52}$$

Si la luz incidente es despolarizada, la irradiancia difundida por la partícula será:

$$I_{sca} = \frac{8\pi^4 N a^6}{\lambda^4 r^2} \underbrace{\left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2}_{*} (1 + \cos^2 \theta) I_i$$
(2.53)

con lo cual, si el término señalado (*) es débilmente dependiente de la longitud de onda (afirmación no válida, por ejemplo, para partículas metálicas) la irradiancia difundida será proporcional a $\frac{1}{\lambda^4}$. Este tipo de difusión es conocida como *difusión Rayleigh*. Las eficiencias de absorción y scattering en este caso, cumplen:

$$Q_{abs} \propto \frac{1}{\lambda}, \quad Q_{sca} \propto \frac{1}{\lambda^4}$$
 (2.54)

es decir, si la extinción es dominada por la absorción, es proporcional a λ^{-1} , mientras que si es dominada por la difusión, varía con λ^{-4} . De tal forma que las longitudes de onda más cortas se extinguen de forma más eficiente que las largas. Esto produce un *desplazamiento hacia el rojo* (en términos del espectro visible) del espectro de la luz transmitida por un grupo de partículas pequeñas, al tiempo que el espectro de la luz difundida sufre un *desplazamiento hacia el azul*. Para este caso, el diagrama de difusión depende fuertemente de la polarización incidente, siendo constante para la componente perpendicular al plano de scattering (véase el caso x = 0.5 en la fig. 2.6):

$$\begin{cases}
i_P = \frac{9|a_1|^2}{4k^2r^2}\cos^2\theta \\
i_S = \frac{9|a_1|^2}{4k^2r^2} \\
i = \frac{1}{2}(i_P + i_S)
\end{cases}$$
(2.55)

Resulta conveniente adelantar aquí, por su interés, uno de los resultados relativos a la parte de polarimetría (sección 2.3). Recordemos que el grado de polarización lineal de un haz de luz viene dado por:

$$P_L = \frac{i_S - i_P}{i_S + i_P} \tag{2.56}$$

Si lo aplicamos a la luz difundida por una partícula en régimen de difusión Rayleigh, por medio de la ec. 2.55 obtenemos:

$$P_L = \frac{1 - \cos^2 \theta}{1 + \cos^2 \theta} \tag{2.57}$$

siempre positivo o cero para partículas pequeñas. Para la luz difundida a 90⁰ resultará $P_L = 1$, como se anticipaba en la fig. 2.6. En difusión Rayleigh, P_L es independiente del tamaño de la partícula. No obstante, la precisión de ésta predicción disminuye a medida que |m| aumenta [6].

Las eficiencias de absorción y de scattering para partículas pequeñas con $\mu_1 = \mu$ pueden escribirse como:

$$a_{1} = -\frac{i2x^{3}}{3}\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \implies \begin{cases} Q_{abs} = 4xIm\underbrace{\left\{\frac{\epsilon_{1} - \epsilon_{m}}{\epsilon_{1} + 2\epsilon_{m}}\right\}}_{*} \\ Q_{sca} = \frac{8}{3}x^{4}\underbrace{\left|\frac{\epsilon_{1} - \epsilon_{m}}{\epsilon_{1} + 2\epsilon_{m}}\right|^{2}}_{*} \end{cases}$$
(2.58)

siendo ϵ_1 la permitividad de la esfera y ϵ_m la del medio.

Como se demostrará a continuación, la cantidad (*) aparece en el problema electrostático de un dipolo dentro de un campo electrostático. Suponiendo un potencial escalar tal que $\mathbf{E}_{\mathbf{i}} = -\nabla \Phi_i$ con i = 1 para el campo dentro de la esfera e i = 2 para el campo en el exterior, se tiene en aproximación de campo lejano:

$$\begin{cases}
\Phi_1 = -\frac{3\epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} E_0 r \cos \theta \\
\Phi_2 = -E_0 r \cos \theta + \underbrace{a^3 E_0 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \frac{\cos \theta}{r^2}}_{p}
\end{cases}$$
(2.59)

donde $|\mathbf{p}| = p = qd$ es el momento dipolar existente entre dos cargas puntuales (+q,-q) separadas una distancia d. En aproximación de dipolo ideal $d \to 0$ y el potencial es:

$$\Phi = \frac{\mathbf{pr}}{4\pi\epsilon_m r^3} = \frac{p\cos\theta}{4\pi\epsilon_m r^2} \tag{2.60}$$

con el siguiente momento dipolar:

$$\mathbf{p} = 4\pi\epsilon_m a^3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \mathbf{E_0}$$
(2.61)

es decir, el campo aplicado induce un momento dipolar en la partícula proporcional al mismo. Para el caso de una esfera se puede especificar una *polarizabilidad*, α , definida como:

$$\begin{cases} \mathbf{p} = \epsilon_m \alpha \mathbf{E_0} \\ \alpha = 4\pi \alpha_{cm} = 4\pi a^3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \end{cases}$$
(2.62)

donde se ha introducido la definición de α_{cm} , la denominada *polarizabilidad de Clausius-Mosotti*, que define una cantidad microscópica en función de cantidades que pueden determinarse en una base macroscópica [61].

Pese a que estos resultados son aplicables sólo a campos estáticos, la extrapolación a ondas planas es directa: Si $\mathbf{p} = \epsilon_m \alpha \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} \mathbf{e}_{\mathbf{x}}$ es el momento dipolar de un dipolo ideal, situado en z = 0 e iluminado por una onda plana polarizada en x, el campo eléctrico irradiado (difundido) por el dipolo es [52]:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{\mathbf{sca}} = \frac{\exp\{ik(r-z)\}}{ikr} \mathbf{X}E\\ \mathbf{X} = \frac{ik^3}{4\pi} \alpha [\mathbf{e}_{\mathbf{r}} \times (\mathbf{e}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{e}_{\mathbf{x}})] \end{cases}$$
(2.63)

donde se ha extraído la parte dependiente de la frecuencia. Las secciones eficaces de extinción y difusión para el dipolo son:

$$\begin{cases} \sigma_{abs} = kIm\{\alpha\} = \pi a^2 4xIm\left\{\frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m}\right\} \\ \sigma_{sca} = \frac{k^4}{6\pi}|\alpha|^2 = \pi a^2 \frac{8}{3}x^4 \left|\frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m}\right|^2 \end{cases}$$
(2.64)

Como se puede apreciar, las relaciones 2.64 y 2.58 son formalmente idénticas. De esta forma el problema de difusión por partículas pequeñas se puede abordar considerando el campo difundido

por dipolos localizados en lugar de las partículas. Esta suposición es correcta siempre que se cumpla $|m|x \ll 1$, condición que implica un parámetro de tamaño muy pequeño y un campo eléctrico incidente cuya frecuencia propia de oscilación (ω) sea suficientemente baja como para que el campo penetre en la partícula. No se ha hecho mención al caso en el que la permeabilidad magnética del medio y la partícula difieren (partículas magnéticas), en cuyo caso habría que tener en cuenta también los dipolos magnéticos.

A partir de la aproximación dipolar para una partícula esférica pequeña se pueden obtener, mediante un razonamiento semejante aunque algo más complejo, las polarizabilidades asociadas a una partícula elipsoidal pequeña, con uno de sus semiejes a_i (i = 1, 2, 3) paralelo al campo incidente:

$$\alpha_i = 4\pi a_1 a_2 a_3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{3\epsilon_m + 3L_i \left(\epsilon_1 - \epsilon_m\right)} \tag{2.65}$$

donde la distribución de carga para el semieje *i-ésimo* es:

$$\begin{cases}
L_{i} = \frac{a_{1}a_{2}a_{3}}{2} \int_{0}^{\infty} \frac{dq}{(a_{i}^{2}+q)f(q)} \\
f(q) = \sqrt{\prod_{i=1}^{3} \left(q + a_{i}^{2}\right)}
\end{cases}$$
(2.66)

El caso particular de esferas pequeñas pero anisótropas, o esferoides cuya orientación es aleatoria necesita de un tratamiento algo más detallado. Para tal propósito se define, en aproximación dipolar, el tensor de polarizabilidad α_{ij} :

$$\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \epsilon_m \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ E_{0z} \end{pmatrix}$$
(2.67)

siendo E_{0x} , E_{0y} y E_{0z} las componentes del campo incidente sobre la partícula relativas a los ejes principales de la misma. De este modo, en virtud del teorema óptico, si la luz incidente está polarizada en dirección x', la sección eficaz de absorción se puede escribir, de forma general como:

$$\sigma_{abs,x'} = \frac{kIm\{p_{x'}\}}{\epsilon_m E_{0x'}} \tag{2.68}$$

con lo cual, para partículas simétricas anisótropas, los promedios estadísticos darán lugar a la obtención de las secciones eficaces de difusión y absorción *medias*: $\langle \sigma_{sca} \rangle$ y $\langle \sigma_{abs} \rangle$.

Partículas Grandes ($r \gg \lambda$): Aproximación Geométrica

Los conceptos aproximados, simples e intuitivos de la óptica geométrica y el trazado de rayos pueden ayudar en la resolución de los problemas de difusión cuando la teoría exacta complica sistemáticamente la solución. Los coeficientes de reflexión y transmisión en la interfase entre la partícula y el medio, es decir, la aplicación de las ecuaciones de Fresnel y la ley de Snell a una estadística de rayos incidentes en la partícula, dan lugar a expresiones concretas para el campo y las eficiencias de scattering que ilustran el proceso en cuestión [62]. En la fig. 2.7 se ilustra el proceso de difusión por una partícula grande.

Para dar una idea del potencial de ésta aproximación a la hora de calcular las eficiencias de los procesos, presento las líneas generales seguidas para su cálculo.

Si I_i es la irradiancia total incidente sobre la partícula, $T(\theta_i, n)$ y $R(\theta_t, \frac{1}{n})$ son la transmitancia y re-

flectancia para luz despolarizada con un ángulo de incidencia θ_i y de transmisión θ_t , $\xi = \frac{2a\sqrt{n^2 \sin^2 \theta_i}}{n}$ es el camino óptico recorrido por el rayo entre los puntos 1 y 2 (fig. 2.7) y α es el coeficiente de absorción de la partícula, la energía absorbida por unidad de tiempo en el interior de la esfera se puede expresar como [6]:

$$W_{abs} = I_i 2\pi a^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left\{ T(\theta_i, n) \left(\sum_{j=0}^{\infty} \left[R(\theta_t, \frac{1}{n}) \exp\{-\alpha\xi\} \right]^j \right) (1 - \exp\{-\alpha\xi\}) \cos\theta_i \sin\theta_i d\theta_i \right\}$$
(2.69)



Figura 2.7: Trazado de rayos para un experimento de difusión por una partícula con $r = a \gg \lambda$

expresión que se consigue mediante la suma de la contribución energética de todas las reflexiones internas de ambas componentes (S y P) de polarización para un rayo incidente dado, que es integrado a todos los posibles ángulos de incidencia (entre 0 y $\frac{\pi}{2}$).

Pese a que las ecuaciones de Fresnel y la ley de Snell son aproximaciones, la ec. 2.69 es completamente general. La suma de la serie infinita es:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left[R(\theta_t, \frac{1}{n}) \exp\{-\alpha\xi\} \right]^j = \frac{1}{1 - R(\theta_t, \frac{1}{n}) \exp\{-\alpha\xi\}}$$
(2.70)

Si suponemos que la partícula absorbe débilmente la luz incidente $(2a\alpha \ll 1)$, los términos de absorción se pueden simplificar quedando como sigue:

$$1 - \exp\{-\alpha\xi\} \simeq \alpha\xi, \quad \frac{1}{1 - R\exp\{-\alpha\xi\}} \simeq \frac{1}{T}$$
(2.71)

habiendo hecho uso de las relaciones recíprocas entre coeficientes de Fresnel y de la conservación de la energía (R + T = 1). Una vez llegado este punto, se obtiene la expresión de la sección eficaz de absorción ($\sigma_{abs} = \frac{W_{abs}}{I_i}$):

$$\sigma_{abs} = \frac{4}{3}\pi a^3 \frac{\alpha}{n} \left[n^3 - (n^2 - 1)^{\frac{3}{2}} \right]$$
(2.72)

La energía difundida por una esfera grande (W_{sca}) puede descomponerse, desde el punto de vista geométrico y en primera aproximación, en las siguientes contribuciones:

$$W_{sca} = W_{dif} + W_{ref} + W_{tr} \tag{2.73}$$

entre las que forman parte la difracción, la reflexión y la transmisión. Esta última se puede descomponer, a su vez, en la contribución tras cada una de las reflexiones internas:

$$W_{tr} = \sum_{j=0}^{\infty} W_{tr,j} \tag{2.74}$$

La eficiencia de reflexión $(Q_{ref} = \frac{W_{ref}}{I_i})$ es:

$$Q_{ref} = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} R(\theta_i) \cos \theta_i \sin \theta_i d\theta_i$$
(2.75)

de forma que, en el límite, toda la luz que entra en una esfera absorbente suficientemente grande es absorbida.

Si la esfera no es absorbente, la eficiencia de difusión podrá expresarse, de forma análoga a la ec. 2.73:

$$Q_{sca} = Q_{dif} + Q_{ref} + Q_{tr}$$

Partículas No Esféricas Regulares e Irregulares: Modelos Computacionales

Las partículas esféricas en la naturaleza son, por norma general, la excepción. No obstante, los modelos matemáticos para simulación más sencillos suelen, con frecuencia, dar resultados muy cercanos a la realidad, utilizando modelos en los que los sistemas son simulados con partículas esféricas, aun cuando el sistema se aleja de dicha suposición. En general, todos los métodos de resolución de problemas de difusión de luz por partículas sin simetría se basan en el hallazgo de expresiones analíticas o numéricas de las amplitudes de difusión, es decir, de los elementos de la matriz de amplitud de scattering (ec. 2.36). Una revisión amplia y bastante detallada acerca de la difusión por partículas irregulares puede encontrarse en la referencia [63].

El método de separación de variables es aplicable en sistemas cuya geometría coincida con sistemas de coordenadas que lo permitan. Anteriormente se ha expuesto el caso de Mie y Rayleigh, ambos basados en este método analítico. Elipsoides y cilindros son ejemplos de aplicación de este método. No obstante, su computación es complicada y lenta, sobre todo en partículas grandes o en las que se necesita un cálculo estadístico de orientaciones.

Uno de los métodos numéricos más utilizados es conocido como *método de dipolo acoplado* (CDM), expuesto por Purcell y Pennypacker [64], que computa el momento dipolar inducido en cada uno de los átomos por el campo incidente y el efecto combinado de éste con el generado por el resto de los átomos. La partícula es dividida en un número de elementos idénticos considerando cada uno de ellos como un oscilador dipolar, cuya polarizabilidad es derivada de la relación de *Clausius-Mosotti* (2.62), obteniendo así la función dieléctrica de la partícula. El campo difundido por cada dipolo es calculado de forma iterativa, de forma que el campo total difundido, las secciones eficaces y el diagrama de difusión pueden ser obtenidos mediante la combinación de todos los campos dipolares.

En la actualidad el CDM ha pasado a denominarse *Aproximación de Dipolo Discreto* (DDA), a la vez que ha sido mejorado en algunos aspectos de cálculo y computación. Existen diversos códigos de implementación del DDA, destacando el de Amsterdam (ADDA) y el código introducido por Draine [8]. La polarizabilidad propuesta por Draine [65] es:

$$\alpha = \frac{\alpha_{cm}}{1 - \frac{2}{3}ik^3\alpha_{cm}} \tag{2.76}$$

donde α_{cm} es la polarizabilidad de Clausius-Mosotti (2.62) y $\frac{2}{3}ik^3$ es la corrección de la reacción de radiación, o corrección radiativa. Si se considera la partícula como un volumen de N dipolos polarizables situados a una distancia r_j (j = 1, ..., N) del origen y caracterizados por una polarizabilidad α_j . Cuando el sistema es excitado por una onda plana monocromática, sobre cada dipolo incide un campo que puede ser separado en dos contribuciones: El campo incidente y el campo radiado inducido por otros dipolos. La suma de ambas contribuciones define el campo local, dado por:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{loc}}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}}) = \mathbf{E}_{\mathbf{j},\mathbf{loc}} = \mathbf{E}_{\mathbf{j},\mathbf{inc}} + \mathbf{E}_{\mathbf{j},\mathbf{dip}} = \mathbf{E}_{\mathbf{0}} \cdot e^{ikr} - \sum_{k \neq j} A_{jk} \mathbf{p}_{\mathbf{k}}$$
(2.77)

donde $\mathbf{p}_{\mathbf{k}}$ es el momento dipolar del elemento k-ésimo y A_{jk} es la matriz de interacción entre dipolos. La solución de las 3N ecuaciones complejas lineales acopladas dadas por $\mathbf{p}_{\mathbf{k}} = \alpha_k \mathbf{E}_{\mathbf{k},\mathbf{loc}}$ da lugar a las secciones eficaces de absorción y difusión. La reiteración del análisis para diversas polarizaciones del haz incidente conforma, finalmente, los patrones de difusión y la matriz de scattering del sistema.

El método T-Matrix [9] está basado en una formulación integral del problema de difusión por una partícula arbitraria. La linealidad de las ecuaciones de Maxwell y las condiciones de contorno (2.31) establecen que los coeficientes del campo difundido estén relacionados linealmente con el campo incidente. Esta relación implica una transformación lineal que conecta ambos, y que viene dada, en formulación matricial de la aplicación lineal, por la matriz de transición o **T**-Matrix. Si la partícula es esférica, la matriz **T** es diagonal, como se ha dejado entrever a lo largo de este epígrafe. Este método ha sido el utilizado para el cálculo de los diagramas de difusión mostrados en la fig. 2.6 [58]. En los últimos años son numerosas las aplicaciones [66] y avances [67] computacionales de este método aplicados a la caracterización de partículas con geometrías complejas.

Existen numerosos métodos de resolución, pero todos ellos tienen algo en común con los mostrados hasta el momento. La complejidad de algunas geometrías y la situación dinámica de algunos sistemas,

como los aerosoles, ha implicado desarrollo del *tratamiento estadístico* aplicado a los métodos tradicionales de difusión. De esta forma, la aleatoriedad a la hora de introducir diversos parámetros en el cálculo (tamaño, geometría, orientación,...) a lo largo de varias iteraciones permite, finalmente, observar las medias estadísticas y simular la difusión por partículas irregulares a partir de una formulación estadística del problema [68].

2.2.2. Difusión por una Partícula Sobre un Substrato

El problema de la difusión de una partícula situada sobre un substrato, va un paso más allá de los casos expuestos anteriormente. Su interés reside, entre otras cosas, en la posibilidad de determinar el tamaño de las partículas, así como en la detección de defectos en la industria de los semiconductores. La interacción partícula substrato presenta un aumento considerable de la complejidad del problema. El supuesto teórico a tratar se expone en la fig. 2.8(a). La forma de abordar el problema depende, fundamentalmente, del procedimiento a seguir para la *implementación del substrato* y la descripción de la interacción de éste con la partícula. Una comparativa entre buena parte de los métodos existentes es relatada en la referencia [69].



Figura 2.8: Difusión por una partícula sobre un substrato.

Teorema de Extinción (ET)

Implementado en un principio para resolver la difusión de luz por substratos rugosos [10], el ET fue ampliado para resolver el problema de difusión por partículas pequeñas en superficies planas. Se deriva directamente de la representación integral de las ecuaciones de Maxwell incluyendo condiciones de contorno extendidas en las superficies. Aparecen así, dos integrales de superficie en el modelo: La primera conecta el campo incidente con la densidad de corriente en las superficies, mientras que la segunda conecta la densidad de corriente en las superficies con el campo difundido:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}') &= \frac{1}{4\pi} \int_{V_i} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot G(\mathbf{r}', \mathbf{r}) dv - \frac{1}{4\pi} \mathbf{S}_i^{int}(\mathbf{r}') \\ & \updownarrow \\ \mathbf{S}_i^{int}(\mathbf{r}') &= \nabla \times \nabla \times \int_{S_i} \left[\mathbf{E}_{int}(\mathbf{r}) \frac{\partial G(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} - G(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{E}_{int}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} \right] ds, \\ 0 &= \mathbf{S}_{ext}(\mathbf{r}') = \sum_i \mathbf{S}_i^{ext}(\mathbf{r}') - \mathbf{S}_{\infty}(\mathbf{r}') \\ & \updownarrow \\ \mathbf{S}_i^{ext}(\mathbf{r}') &= \nabla \times \nabla \times \int_{S_i} \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}) \frac{\partial G(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} - G(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} \right] ds \end{aligned}$$
(2.78)

donde S^{int} y S^{ext} son las superficies de integración en el límite interior y exterior del substrato y la partícula (las partículas, en caso de resolución para un sistema de varias partículas); $G(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ es la función de Green bidimensional, $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ son las fuentes del campo eléctrico, $\mathbf{E}_{in}(\mathbf{r})$ es el valor límite del campo eléctrico en la superficie S_i , y S_{∞} tiene el mismo significado que S^{ext} tomando una superficie de integración cuyo radio puede ser considerado infinito.

En términos generales, se podría afirmar que la densidad de corriente superficial es la fuente del campo electromagnético difundido. La discretización del problema permite transformar las integrales en sistemas de ecuaciones lineales. Para la resolución, pues, no son necesarias más aproximaciones ya que la interacción substrato partícula está incluída en la resolución, así como otros efectos superficiales (e.g. generación de plasmones en substratos metálicos [70]). Las restricciones al modelo aparecen únicamente en la implementación numérica y la discretización, ya que puede ser considerada cualquier geometría para la partícula y el substrato, con la condición de que el número de elementos en la discretización sea suficiente para la resolución del sistema de ecuaciones. La potencia de este método radica en la posibilidad de realización de cálculos para campo cercano y en su generalización para varios difusores cuyas superficies no están conectadas [71].

Teoría de la Imagen (IT)

Esta aproximación consiste en resolver las condiciones de contorno en la partícula y el substrato al mismo tiempo. Las componentes del campo electromagnético (incidente, interna, difundida y de interacción) son expandidas de acuerdo con el método de separación de variables en armónicos esféricos vectoriales [72] para dos sistemas de coordenadas: El propio de la partícula y el de su partícula imagen (fig. 2.8(b)), situada al otro lado de la superficie plana. El campo incidente es, pues, la suma del que llega directamente a la partícula y del que es reflejado en el substrato. El campo de interacción es el difundido por la partícula imagen y puede ser considerado como una parte del campo incidente en la partícula. La aplicación del método T-Matrix sobre la partícula aislada satisfará las condiciones de contorno de la misma. El substrato presenta un mayor problema, siendo necesario un análisis diferente para substratos conductores perfectos y para los que no lo son. En los primeros, la introducción de los campos de interacción de la imagen de la partícula, que son exactamente la imagen de los campos de interacción de la partícula, permite resolver las condiciones de contorno. El campo total difundido es, pues, la suma de los campos difundidos por la partícula y su imagen. Para los substratos que no son conductores perfectos, una de las aproximaciones más factibles consiste en suponer que el campo de interacción es la imagen del difundido, pero multiplicado por el coeficiente de reflexión de Fresnel en incidencia normal. El campo total es, de este modo, la suma del difundido por la partícula y del difundido por su imagen una vez ha sido multiplicado por el coeficiente correspondiente. Del mismo modo que el ET, este método puede ser utilizado para el cálculo en la región de campo cercano. Son numerosos las referencias que comparan resultados experimentales y los obtenidos con este método [73, 74].

Modelo de Doble Interacción Modificado (MDIM)

Este método es una versión mejorada del *modelo de doble interacción* propuesto en [75]. El algoritmo utiliza un modelo de trazado de rayos sobre el que se aplica la teoría de Mie para manipular el campo difundido y difractado por la esfera. Incorpora el efecto del substrato mediante la adición de las relaciones de Fresnel para las diferentes reflexiones. Como se puede apreciar en la fig. 2.8(c), la partícula es iluminada por un haz primario y por la reflexión especular de éste sobre el substrato, que conforma el haz secundario. El haz secundario presenta un desfase propio correspondiente a la diferencia de camino óptico con respecto al primario y a la reflexión. Del mismo modo, existen dos contribuciones al campo difundido en una dirección arbitraria, la procedente directamente de la partícula y la que, tras partir de ésta, se ve reflejada en el substrato. Como es lógico tras la exposición anterior, la segunda contribución presenta un desfase con respecto a la primera exactamente por los mismos motivos que presentaba un desfase el haz secundario con respecto al primario. El campo total se puede calcular a partir de las cuatro componentes así planteadas:

- 1. La componente del haz primario que llega al detector procedente directamente de la partícula.
- 2. La componente del haz primario que incide en la partícula y llega al detector tras reflejarse en el substrato.
- 3. La componente del haz secundario que llega al detector procedente directamente de la partícula.

4. La componente del haz secundario que incide en la partícula y llega al detector tras reflejarse en el substrato.

En este modelo la interacción entre la partícula y su imagen no es tenida en cuenta. Sin embargo, se puede abordar un problema: El efecto de sombreado. Cuando la incidencia del haz primario es normal, la partícula crea una sombra sobre la región que correspondería a su imagen. Del mismo modo, las contribuciones 2, 3 y 4 se ven modificadas a medida que se varía el ángulo de incidencia del haz principal. El método MDIM introduce un *factor de sombreado* geométrico para que la variación en estas contribuciones debida al ángulo de incidencia sea tenida en cuenta. La mayor aportación de este método es su gran claridad a la hora de relacionar las distintas contribuciones y el factor de sombreado con los parámetros físicos externos, como el ángulo de difusión o el tamaño de la partícula [76] e, incluso, circunstancias ajenas a la partícula, como defectos en el substrato [77, 12] y pseudo-enterramientos de la partícula en éste [60]. Las partículas regulares e irregulares pueden ser implementadas calculando su difusión con métodos más complejos que la teoría de Mie, como T-Matrix o DDA, y la aplicación de las contribuciones y el factor de sombreado al campo total difundido.

FDTD

El método de las Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD) es apropiado para resolver problemas electromagnéticos transitorios utilizando diferencias finitas, aunque se puede usar para obtener el resultado estacionario. El método fue desarrollado, en un principio, para resolver las ecuaciones de Maxwell [11] y es un caso particular del método de Diferencias Finitas, ampliamente utilizado para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales. La elección conveniente de los puntos en que se evalúan las componentes de los campos en estas ecuaciones da lugar a la solución al sistema de ecuaciones que satisface las condiciones de contorno.

Los algoritmos basados en el método FDTD son frecuentes en la actualidad debido a su flexibilidad y su fácil implementación, soportada por distintas versiones libres (Meep MIT, GFDTD, ...) y comerciales (que facilitan el proceso de diseño geométrico de los difusores). Sus limitaciones más importantes son la dependencia que la estabilidad de los resultados presenta ante la discretización de los cuerpos difusores y la integración en el tiempo, y la elevada potencia de computación necesaria para resolver los distintos algoritmos.

Óptica Geométrica: Trazado de Rayos (RT)

Este método, aunque en principio sólo es aplicable a partículas grandes, ha sido aplicado al cálculo de densidades de partículas en superficies [78] y a la simulación de estados de polarización inducidos por superficies rugosas [79]. El modelo es simple y directo: En términos geométricos una onda plana que incide sobre la partícula, o sistema difusor, es un grupo de rayos paralelos de densidad uniforme que es reflejado por la partícula y el substrato. Cuando el rayo alcanza una superficie, la propagación o reflexión de éste depende de las relaciones de Fresnel. El campo difundido se calcula mediante la suma coherente de los rayos que emergen del sistema con una dirección (ángulo de difusión) determinada. La difusión multiple es inherente al modelo, ya que las reflexiones múltiples entre partícula y substrato son tenidas en cuenta desde el primer momento. Pese a que los tamaños de partícula para este modelo deberían ser mucho mayores que la longitud de onda, recientes resultados muestran que, incluso para sistemas difusores cuyo tamaño es comparable a la longitud de onda, el método reproduce de forma interesante simulaciones realizadas con FDTD [80]. Implementaciones más complicadas, con la adición de la teoría de la difracción, hacen este método más preciso y amplían su rango de validez [39].

Simulaciones Integrales: Integral Sommerfeld

La mayoría de métodos de los que se ha hablado tienen puntos en común. Algunos de ellos se podrían englobar en un apartado de simulaciones integrales. El último al que se hará una breve referencia, por su especial interés en el estudio de plasmones superficiales y de ondas evanescentes, es la integral de Sommerfeld [81]. Se utiliza, fundamentalmente, en el tratamiento de partículas pequeñas sobre substratos. El modelo extrapola el tamaño de la partícula suponiendo que se comporta como un dipolo puntual, y considera que dicho dipolo y su imagen (dipolo imagen) son equidistantes al sustrato. Una vez establecidas las condiciones de contorno y habiendo aplicado una transformada de Fourier a los campos, se puede escoger la función de Green apropiada que transforma el problema en una integral tipo Sommerfeld para el campo eléctrico.

2.2.3. Difusión Múltiple

Pese a que ya se han adelantado algunas definiciones, en un sistema de partículas en volumen o partículas sobre sustrato se habla de difusión múltiple cuando las partículas interaccionan entre sí. De esta forma, el medio no puede considerarse *diluído* y la contribución al campo que recibe cada uno de los elementos no es debida sólo al campo original, sino también a los campos difundidos por el resto de elementos que componen el sistema (partículas y/o substrato). La práctica totalidad de los métodos aplicados al problema de una partícula situada sobre un substrato plano pueden ser aplicados a la resolución de los problemas de difusión múltiple [82, 83]. Sin embargo, la potencia de cálculo, la precisión numérica y la relativamente sencilla implementación de los elementos difusores, hacen que algunos de ellos (cabe destacar el DDA, el T-Matrix, y el FDTD) sean preferidos frente a los otros. Además de todos los métodos, no es poca la bibliografía existente sobre la resolución analítica de sistemas difusores susceptibles de presentar difusión múltiple [84].

En ocasiones, un sistema de muchas partículas puede ser tratado de forma asociativa, es decir, como un conjunto de sistemas independientes con una sola partícula. Este supuesto es conocido como SSA (Single-Scattering Approximation). Esta aproximación puede ser aplicada a grupos aleatorios de partículas pequeñas suficientemente separadas, observadas en la región de campo lejano. El campo total difundido es la suma coherente del campo difundido por cada una de ellas.

Los efectos de la difusión múltiple se ponen de manifiesto en diversas magnitudes analizadas en los procesos de difusión. La difusión múltiple causa desplazamientos y enmascaramientos en los mínimos interferenciales de los diagramas de difusión en intensidad. Estos desplazamientos son, a su vez, sensibles al tipo de polarización del haz de entrada [85]. Cuando la difusión múltiple se hace más acusada, los efectos de despolarización en la luz emergente de los sistemas de partículas se ponen de manifiesto. El hecho de que las partículas presenten orientaciones aleatorias y distintos tamaños actúa, a efectos del campo difundido, como un despolarizador que enmascara toda la información contenida en la matriz de difusión. Los mínimos, característicos de cada tamaño y orientación, se ven promediados, disminuyendo la visibilidad de éstos en los diagramas de difusión, debido a la mezcla estadística de intensidades. Se ha comprobado cómo, en agregados de partículas Rayleigh cuyo tamaño total es similar a la longitud de onda del haz incidente, aparece una mezcla de efectos debidos al agregado en sí, comportándose como una partícula de tipo Mie, y a las nanopartículas constituyentes del mismo, siempre unidos a una parte de despolarización característica de los fenómenos de difusión múltiple [63].

Realmente podemos considerar la interacción de partículas sobre sustratos o medios cercanos como un caso de interacción múltiple. De hecho, algunos métodos utilizados para resolver problemas de una partícula sobre sustrato incluyendo interacción son aplicables al caso de muchas partículas que interaccionan. Un ejemplo reciente del interés que tienen estas situaciones, de especial importancia por su aplicación directa y actualidad, es el del desplazamiento espectral en nanopartículas metálicas [86], utilizado en microscopía de campo cercano (SNOM) [87].

2.3. Polarimetría

Se puede definir la polarización como el comportamiento del campo eléctrico vectorial, asociado a la propagación de luz, al observarlo desde un punto fijo del espacio. Tal y como aparece en la ec. 2.32, el campo eléctrico de una onda electromagnética que se propaga en una determinada dirección, puede ser descompuesto en dos estados ortonormales [1] y transversales a la dirección de propagación. Supongamos que el campo se propaga en la dirección del eje z y que las ondas son armónicas temporales, entonces

$$\mathbf{E} = \underbrace{a_x \cos(\phi + \delta_x)}_{E_x} \mathbf{e}_{\mathbf{x}} + \underbrace{a_y \cos(\phi + \delta_y)}_{E_y} \mathbf{e}_{\mathbf{y}}$$
(2.79)

donde a_x y a_y son las amplitudes de cada componente, y $\phi = kz - \omega t$. Desarrollando y haciendo $\delta = \delta_y - \delta_x$

$$\left(\frac{E_x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{E_y}{a_y}\right)^2 - 2\frac{E_x}{a_x}\frac{E_y}{a_y}\cos\delta = \sin^2\delta \tag{2.80}$$

que es la ecuación de la elipse de polarización en el sistema de referencia de los estados ortonormales $x \in y$ [2]. Existen varias posibilidades de polarización, según los parámetros de la ecuación:

- Si $0 < \delta < \pi$, la polarización de la luz es elíptica dextrógira.
- Si $\pi < \delta < 2\pi$, la polarización es elíptica levógira.
- Si $\delta = 2\pi$, π , 0, la polarización es lineal.
- Si $\delta = \frac{\pi}{2} (a_x = a_y)$, la polarización es circular dextrógira.
- Si $\delta = \frac{3\pi}{2} (a_x = a_y)$, la polarización es circular levógira.

En la fig. 2.9(a) se ha representado la elipse de polarización, con $a ext{ y } b$ como semieje mayor y menor, respectivamente, en su sistema de coordenadas propio x'y'. En ella se pueden definir tres magnitudes angulares, el acimut (χ) , la elipticidad (ϵ) y la relación entre amplitudes de los estados ortonormales $(\alpha = \arctan \frac{a_y}{a_x})$. Estas magnitudes angulares, de gran utilidad a la hora de describir algunos elementos en sistemas polarimétricos, junto con el desfase (δ) entre estados ortonormales, cumplen una serie de relaciones [88]:

$$\begin{cases} \tan 2\chi = \tan 2\alpha \cos \delta \\ \sin 2\epsilon = \sin 2\alpha \sin \delta \\ \cos 2\alpha = \cos 2\epsilon \cos 2\chi \\ \tan \delta = \frac{\tan 2\epsilon}{\sin 2\chi} \end{cases}$$
(2.81)



(a) Elipse de Polarización

(b) Esfera de Poincaré

Figura 2.9: Representaciones de la luz polarizada.

2.3.1. Formalismos de Jones, Stokes y Mueller

Dada la expresión para el vector campo eléctrico de la ec. 2.79, se denomina vector de Jones al vector columna:

$$\boldsymbol{\varepsilon} \equiv \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = e^{i\Gamma} \begin{pmatrix} a_x e^{-i\delta/2} \\ a_y e^{i\delta/2} \end{pmatrix} \implies \Gamma = \phi + \frac{\delta_x + \delta_y}{2}$$
(2.82)

que contiene toda la información relativa al campo en cuestión. Dos estados de polarización serán ortogonales cuando $\varepsilon_1^+ \varepsilon = \varepsilon^+ \varepsilon_1 = 0$ (por ejemplo $\mathbf{E}_{\mathbf{x}}$ y $\mathbf{E}_{\mathbf{y}}$, o bien, $\mathbf{E}_{\mathbf{S}}$ y $\mathbf{E}_{\mathbf{P}}$). ε^+ es el transpuesto conjugado del vector ε . Cuando una onda dada ε incide en un medio óptico sin producir efectos incoherentes, la onda electromagnética que surge ε' está relacionada con la incidente por la relación:

$$\boldsymbol{\varepsilon}' = \underbrace{\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}}_{\mathbf{J}} \boldsymbol{\varepsilon}$$
(2.83)

donde **J** es la *matriz de Jones* asociada al medio óptico. A partir de la ec. 2.82 se puede deducir que el vector de Jones está definido exclusivamente para la luz polarizada. Cualquier medio que disminuya el grado de polarización (ec. 2.56, pg. 18) del haz incidente no puede ser representado por la matriz de Jones. Salvando este aspecto, existe una relación directa entre las expresiones 2.36 y 2.82, que pone de manifiesto la dependencia angular de la matriz de Jones. Asimismo, en los procesos de difusión en los que no aparecen efectos incoherentes, la matriz de amplitud de scattering coincide con la matriz de Jones. Cuando un haz de luz monocromática incide sucesivamente en varios sistemas ópticos no despolarizantes, el vector de Jones final es el resultante de aplicar sucesivamente las matrices de Jones de cada uno de los medios sobre el vector de Jones emergente del medio anterior [2]. Del mismo modo, la matriz de Jones asociada a una serie de medios ópticos no despolarizantes es igual al producto ordenado de las matrices de Jones de cada uno de los medios (por norma general no se cumple la propiedad conmutativa):

$$J = J_n \cdot J_{n-1} \cdots J_2 \cdot J_1$$

Es obvio que entendemos por producto ordenado aquel en el que el primer medio que actúa sobre el haz incidente, J_1 , es también el primero que actúa sobre el vector de Jones del haz incidente. Esto implica que el orden de actuación de los sistemas en su representación matricial es de derecha a izquierda. Esto se cumple tanto para el formalismo de Jones, del que estamos hablando, como para el formalismo de Mueller, del que hablaremos más adelante. A partir del vector de Jones podemos definir la matriz de coherencia o matriz de polarización [89]:

$$\Phi = \boldsymbol{\varepsilon} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{+} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{1}\varepsilon_{1}^{*} & \varepsilon_{1}\varepsilon_{2}^{*} \\ \varepsilon_{2}\varepsilon_{1}^{*} & \varepsilon_{2}\varepsilon_{2}^{*} \end{pmatrix}$$
(2.84)

la cual puede ser expresada como una combinación de las matrices de Pauli [90] y la matriz identidad

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$
(2.85)

que constituyen una base del espacio de matrices Hermíticas 2×2 [91]. De este modo la matriz de coherencia se podría escribir como

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{3} s_i \sigma_i$$
 (2.86)

Los coeficientes s_i son los parámetros de Stokes:

$$s_i = tr(\sigma_i \Phi), \quad i = 0, 1, 2, 3$$
 (2.87)

 s_i son cantidades observables y susceptibles de ser medidas en el laboratorio. Los parámetros de Stokes cumplen las siguientes restricciones, resultantes de la condición no negativa de la matriz de coherencia

$$s_0 \ge 0, \quad s_0^2 \ge s_1^2 + s_2^2 + s_3^2$$

$$(2.88)$$

La igualdad en la segunda de las expresiones sólo se cumple en el caso de que la luz esté totalmente polarizada. El *vector de Stokes* se define a partir de los parámetros de Stokes, como

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x E_x^* + E_y E_y^* \\ E_x E_x^* - E_y E_y^* \\ E_x E_y^* + E_y E_x^* \\ i(E_x E_y^* - E_y E_x^*) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_x^2 + a_y^2 \\ a_x^2 - a_y^2 \\ 2a_x a_y \cos \delta \\ 2a_x a_y \sin \delta \end{pmatrix}$$
(2.89)

en donde se han utilizado las definiciones previas. O bien, denominando $I=a_x^2+a_y^2$ y usando la igualdad 2.81

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} I \\ I\cos 2\epsilon\cos 2\chi \\ I\cos 2\epsilon\sin 2\chi \\ I\sin 2\epsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I \\ I\cos 2\alpha \\ I\sin 2\alpha\cos 2\delta \\ I\sin 2\alpha\sin \delta \end{pmatrix}$$
(2.90)

Si definimos el grado de polarización $P = \frac{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2}}{s_0}$, entonces

$$\mathbf{s} = I \begin{pmatrix} 1 \\ P\mathbf{u} \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \cos 2\epsilon \cos 2\chi \\ \cos 2\epsilon \sin 2\chi \\ \sin 2\epsilon \end{pmatrix}$$
(2.91)

y estamos en situación de representar los estados de polarización en la esfera de Poincaré (fig. 2.9(b)), donde \mathbf{u} es el vector unitario que define la dirección $\overline{0P}$ y todos los estados presentan la intensidad normalizada. Los puntos de la superficie de la esfera son estados puros (luz totalmente polarizada) mientras que los interiores representan estados de luz parcialmente polarizada. El origen representa la luz natural o totalmente despolarizada. Podemos definir el grado de polarización lineal y circular [3] como:

$$\begin{cases}
P_L = \sqrt{s_1^2 + s_2^2} / s_0 \\
P_C = s_3 / s_0
\end{cases}$$
(2.92)

Un haz de luz parcialmente polarizado (P < 1) puede ser considerado como la superposición de un haz totalmente polarizado y un haz totalmente despolarizado [1]:

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix} = \mathbf{s}_{\mathbf{P}} + \mathbf{s}_{\boldsymbol{\Delta}} = s_0 P \begin{pmatrix} 1 \\ s_1/s_0 \\ s_2/s_0 \\ s_3/s_0 \end{pmatrix} + s_0 (1-P) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(2.93)

Dado que el formalismo de Jones no es apropiado para la representación de la luz parcialmente polarizada, el formalismo de Stokes se erige como imprescindible a la hora de interpretar situaciones reales, que se alejan en mayor o menor medida de la idealización que supone una polarización total (P = 1). Cuando un haz con un estado de polarización cualquiera, definido por s, incide sobre un medio, el estado de la luz que emerge del medio se caracteriza por un vector de Stokes s', que está relacionado con el del haz incidente por medio de la *matriz de Mueller* (también denominada matriz de difusión o de scattering):

$$\mathbf{s}' = M\mathbf{s} = (m_{ij})\mathbf{s}, \quad i, j = 0, \dots, 3$$
 (2.94)

que es una matriz 4×4 que depende, al igual que la matriz de Jones para estados puros, de la dirección y longitud de onda del haz incidente y del emergente. A diferencia de la matriz de Jones, la matriz de Mueller está definida en base a una aplicación lineal entre vectores de Stokes, por lo que es susceptible de ser utilizada para describir los procesos en los que está involucrada la luz parcialmente despolarizada. La matriz de Mueller es característica de cada medio óptico, constituye un formalismo apropiado para describir todas las características polarimétricas de un sistema (independientemente del estado de polarización de la luz incidente en el sistema), con la salvedad de no considerar procesos no lineales o inelásticos.

Estructura General de la Matriz de Mueller

La estructura de una matriz de Mueller genérica m_{ij} (ec. 2.94) puede ser analizada "grossomodo" por zonas, según afecten cada uno de sus elementos al vector de Stokes emergente del sistema óptico [92]:

$$M = m_{00} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{D}^{T} \\ \mathbf{P} & m_{3\times3} \end{pmatrix} \begin{cases} \mathbf{D} = \frac{1}{m_{00}} \begin{bmatrix} m_{01} & m_{02} & m_{03} \end{bmatrix}^{T} \\ \mathbf{P} = \frac{1}{m_{00}} \begin{bmatrix} m_{10} & m_{20} & m_{30} \end{bmatrix}^{T} \end{cases}$$
(2.95)

donde **D** y **P** son el vector *Diatenuación* y *Polarizancia*, respectivamente. El primero de ellos es el responsable de la intensidad luminosa que es transmitida por el sistema en función de la polarización que presenta el haz incidente, mientras que el segundo es el responsable del estado de polarización emergente tras incidir en el sistema con un haz de luz despolarizada, o luz natural. En ocasiones se denomina *Polarizancia Directa* al vector Polarizancia y *Polarizancia Inversa* al vector Diatenuación, haciendo referencia a la capacidad del medio de polarizar la luz despolarizada cuando la dirección de incidencia y observación se intercambian. Ambos están relacionados con procesos de dicroísmo. Por último, la submatriz $m_{3\times3}$ es la responsable de los fenómenos relacionados con lo que se denomina comúnmente *actividad óptica*, rotación o giro introducido en el estado de polarización de la luz por el material, y con la birrefringencia del mismo [93, 94].

Al igual que en el formalismo de Jones, cuando un haz de luz incide sucesivamente sobre varios medios, el vector de Stokes del haz emergente puede ser calculado a partir de la aplicación sucesiva de cada una de las matrices de Mueller de los medios sobre los vectores de Stokes del haz emergente del medio anterior. Es decir, la matriz de Mueller asociada a una serie de medios ópticos es igual al producto ordenado de sus matrices respectivas:

$$\mathbf{s}' = M\mathbf{s} = \underbrace{M_n \cdot M_{n-1} \cdots M_2 \cdot M_1}_{M} \mathbf{s}$$
(2.96)

A partir de la definición de la matriz de coherencia y de los parámetros de Stokes se pueden relacionar los formalismos de Jones y Mueller para sistemas puros (aquellos que no despolarizan la luz incidente polarizada) [95]:

$$s_{i}^{\prime} \stackrel{2.94}{=} \sum_{j=0}^{3} m_{ij} s_{j} \stackrel{2.87}{=} tr(\sigma_{i} \Phi^{\prime}) \stackrel{2.84}{=} tr(\sigma_{i} [\varepsilon^{\prime} \times \varepsilon^{\prime+}]) = tr(\sigma_{i} [J\varepsilon \times \varepsilon^{+} J^{+}]) =$$

$$tr(\sigma_{i} J[\varepsilon \times \varepsilon^{+}] J^{+}) = tr(\sigma_{i} J \Phi J^{+}) =$$

$$\stackrel{2.86}{=} tr(\frac{1}{2} \sigma_{i} J \sum_{j=0}^{3} s_{j} \sigma_{j} J^{+}) = \sum_{j=0}^{3} \left[tr(\frac{1}{2} \sigma_{i} J \sigma_{j} J^{+}) \right] s_{j}, \quad i = 0, 1, 2, 3$$

$$(2.97)$$

Es obvio que, para sistemas puros, los elementos de la matriz de Mueller se pueden relacionan con los de la matriz de Jones. Como se ha demostrado en la ec. 2.97, dicha relación viene dada por

$$m_{ij} = tr(\frac{1}{2}\sigma_i J\sigma_j J^+) \quad i, j = 0, \dots, 3$$
 (2.98)

que representa la relación de equivalencia entre formalismos, con $M = (m_{ij})_{i,j=0}^3$. Asimismo, las matrices $J^+ ext{ y } J^T$, traspuesta conjugada y traspuesta de la matriz de Jones J, tienen su equivalencia en las matrices de Mueller $M^T ext{ y } M'$, respectivamente, con [96]:

$$M' = \begin{pmatrix} m_{00} & m_{10} & m_{20} & -m_{30} \\ m_{01} & m_{11} & m_{21} & -m_{31} \\ m_{02} & m_{12} & m_{22} & -m_{32} \\ -m_{03} & -m_{13} & -m_{23} & m_{33} \end{pmatrix}$$
(2.99)

2.3.2. Representaciones Matriciales de Medios Ópticos

Como hemos visto, conocido el estado de polarización de la luz incidente sobre cualquier medio, las características polarimétricas de la luz difundida por el mismo están determinadas por su matriz de Mueller. Esta dependerá de la forma, la composición y las propiedades inherentes del medio, así como de la dirección de observación para una incidencia dada. Asimismo, la igualdad 2.98 establece que, del mismo modo, los medios que no presentan despolarización ni fenómenos incoherentes, pueden ser caracterizados por su matriz de Jones. Existen una serie de medios de gran importancia para esta memoria, por lo que creo conveniente introducir aquí brevemente algunas de las características y relaciones de constitución de los mismos, así como su descripción matricial para mejorar el devenir de los próximos epígrafes. En general, y salvo por la adición de un apartado específico para medios despolarizadores, los elementos ópticos que se definen en la tabla 2.1 (pg. 38) son puros.

Rotores y Sistemas de Coordenadas

Un rotor o giro $M_G(\theta)$ (pg. 38) es un elemento óptico que gira un ángulo θ un vector de Stokes. La representación matricial de un rotor en el formalismo de Mueller es la de una matriz de giro θ en el espacio de matrices 4×4 . Para un medio óptico cualquiera, sobre el que incide un haz cuyo vector de Stokes $\mathbf{s_i}$ definido en un sistema de coordenadas \overline{XY} ortogonal a la dirección de propagación del haz, cuya matriz de Mueller en dicho sistema de coordenadas es M_1 , se puede conocer la matriz de Mueller relativa a un sistema de coordenadas $\overline{X'Y'}$ (M_2), también ortogonal a la dirección de propagación, girado un ángulo θ con respecto al primero, mediante una rotación del sistema de coordenadas [97]:

Dada la forma de trabajo de los Rotores, la selección de los sistemas de coordenadas para los haces incidente y emergente no es importante a la hora de determinar los estados de polarización de estos, pero es crucial para identificar las características polarimétricas del medio. Los medios que introducen giros en los estados de polarización de la luz son denominados medios ópticamente activos.

Diatenuadores y Polarizadores

Se denomina diatenuador a un medio óptico polarizante que aplica transmitancias de forma selectiva para dos estados de polarización de entrada. Los polarizadores son diatenuadores que presentan una diatenuación, diferencia entre los coeficientes de transmisión de los estados propios ($|\mathbf{D}|$, según la ec. 2.95), cercana a 1. Algunos diatenuadores lineales bien conocidos son los materiales dicroicos y las superficies metálicas y dieléctricas. Se denomina diatenuador homogéneo a aquel que tiene dos estados propios ortogonales y puede ser representado dentro de un formalismo matricial de Jones (tabla 2.1, pg. 38). Un diatenuador elíptico homogéneo es ópticamente equivalente a un diatenuador lineal, situado entre dos retardadores lineales alineados con éste. La forma de construir la matriz de un diatenuador elíptico es, por tanto, la siguiente:

$$M_D(p_1, p_2, \alpha, \beta) = M_R(0, -\beta)M_G(-\alpha)M_D(p_1, p_2)M_G(\alpha)M_R(0, \beta)$$
(2.101)

donde p_1 y p_2 son los coeficientes de transmisión en amplitud para los estados propios de polarización, β es responsable de la elipticidad de los mismos y α y $\alpha + \frac{\pi}{2}$ son sus acimuts.

Retardadores Ideales y Reales

Un retardador es un medio óptico no absorbente y birrefringente, es decir, que presenta diferentes índices de refracción para sus dos estados ortogonales de polarización. En ocasiones, bajo determinadas circunstancias, son denominados compensadores [2]. Un retardador elíptico (pg. 38) introduce un retardo δ entre sus estados propios de polarización, cuya elipticidad ξ y acimut φ con respecto al sistema de coordenadas del haz incidente, están relacionados de acuerdo a la ec. 2.81 que, para este caso, se transforma en:

$$\begin{cases} \tan 2\varphi = \tan 2\alpha \cos \psi \\ \sin 2\xi = \sin 2\alpha \sin \psi \end{cases}$$
(2.102)

estando definidos en los límites $0 \le \alpha \le \frac{\pi}{2}$ y $-\pi \le \psi \le \pi$.

La matriz de un retardador elíptico puro (tanto en el formalismo de Jones como de Mueller) puede ser construida como [91]:

$$M_R(\varphi,\delta,\psi) = M_R(0,-\psi)M_G(-\varphi)M_R(0,\delta)M_G(\varphi)M_R(0,\psi)$$
(2.103)

de forma que ψ informa acerca de la elipticidad del retardador. Esta formulación que es equivalente a [96]:

$$M_R(\varphi, \delta, \theta) = M_R(\varphi, \delta) M_G(\theta) \tag{2.104}$$

donde θ es el giro introducido por el retardador (relacionado con la elipticidad de sus estados propios). Esta equivalencia en la generación de la matriz de un retardador, permitirá utilizar ambas formas de construcción indiferentemente según se crea conveniente el uso de una u otra.

No obstante, todas estas definiciones hacen referencia a retardadores elípticos puros ideales. Sin embargo, los retardadores reales presentan, por norma general, unas transmitancias para sus estados propios (lineas neutras) distintas de 1. Esta circunstancia puede ser incorporada a la representación matricial mediante la matriz de Mueller de un retardador elíptico real, de forma que la matriz del retardador lineal, $M_R(0, \delta)$, debe ser sustituida en la ec. 2.103 por el producto de un diatenuador lineal cuyos estados propios están alineados, $M_D(k_1, k_2)$, con un retardador lineal:

$$M_R(k_1, k_2, 0, \delta) = M_D(k_1, k_2) M_R(0, \delta)$$
(2.105)

donde $M_R(k_1, k_2, 0, \delta)$ es la matriz del retardador elíptico real, de forma que k_1 y k_2 son los coeficientes de transmisión en amplitud para los estados propios de polarización. Así, mediante un proceso de composición semejante al de un retardador elíptico puro ideal, se obtendría la matriz de Mueller de un retardador elíptico real.

Despolarizadores

Son aquellos medios que causan una reducción del grado de polarización del haz emergente con respecto al haz incidente. Se entiende que un despolarizador es total cuando únicamente el elemento $m_{00} = 1$ es distinto de 0. Un despolarizador parcial ideal es aquel que cumple $m_{00} = 1$, $0 < m_{ii} < 1$ para i = 1, 2, 3 y $m_{ij} = 0$ para todo $i \neq j$. Sin embargo, tal como se puede ver en la tabla 2.1 (pg. 38), la expresión más general para un despolarizador real $M_{\Delta}(d_i, a_i, z_i)$, cuyos coeficientes de despolarización son los elementos d_i y a_i , presenta la aparición de un vector polarizancia característico del medio despolarizante $\mathbf{P}_{\Delta} = \begin{bmatrix} z_1 & z_2 & z_3 \end{bmatrix}^T$, actuando como un despolarizador tras el que se sitúa un polarizador [98].

2.3.3. Dispositivos de Medida

Tras el análisis realizado en las secciones precedentes, es inmediato interpretar que cualquier fenómeno de difusión es susceptible de ser caracterizado mediante su matriz de Mueller asociada; matriz que será característica para cada longitud de onda del haz incidente, dirección de incidencia y dirección de detección (dirección del haz emergente considerado). Es decir, existe una relación directa entre la matriz de Mueller del medio y las propiedades físicas de éste. He aquí el punto de partida de la Polarimetría: La resolución del problema inverso interpretando la información obtenida del análisis polarimétrico de la luz emergente de un medio. Mediante la incidencia con un haz cuya intensidad y características polarimétricas se conocen, y el análisis de las características polarimétricas del haz emergente, pretendemos conocer las propiedades del medio (geométricas, ópticas, estadísticas, etc.).

En general, *Elipsometría* y *Polarimetría* suelen tratarse indiferentemente. No obstante, el término Elipsometría hace referencia a la caracterización de los parámetros de la elipse de polarización (elipticidad, acimut y excentricidad) del campo eléctrico, mientras que Polarimetría es la caracterización del estado de polarización de un haz de luz. En esta memoria, entendiendo la mayor generalidad que representa el término Polarimetría a la hora de obtener información sobre un sistema óptico que modifica el estado de polarización de un haz luminoso, se utilizará preferentemente este término. No obstante, dada la diversidad de dispositivos experimentales diseñados para extraer la información polarimétrica de los sistemas, se intentará respetar los nombres que se le han dado a estos en las distintas referencias. Sin embargo, parece aceptado que el término Elipsometría tiene su uso principal en la determinación de las propiedades ópticas de superficies mediante reflexión [3].

La caracterización polarimétrica de un vector de onda, en su descripción más general, se realiza mediante la mediad de la intensidad transmitida a través de un *analizador de estados de polarización*



Figura 2.10: Esquema general de un dispositivo polarimétrico.

(PSA). Se denomina analizador a un elemento cuya transmisión es proporcional a la cantidad de un estado de polarización específico contenida en un haz. El estado de polarización transmitido por un analizador, sin embargo, no tiene por qué ser el mismo que se pretende analizar. Caracterizar un medio requiere, por tanto, de la introducción de un haz cuyo estado de polarización sea controlado mediante un *generador de estados de polarización* (PSG), y la detección de la intensidad transmitida por el haz emergente a través de un PSA (fig. 2.10). Generalmente, y salvo que se indique lo contrario, se denominará analizador al polarizador de salida de un sistema óptico.

Elipsómetros

Pese a la enorme variedad de dispositivos existentes en la bibliografía (cito, por su interés, los descritos en las referencias [99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 47, 106]), las diferencias de funcionamiento entre los principales sistemas de medida son pequeñas en lo esencial, ya que los principios de funcionamiento básico son comunes a todos ellos.

Elipsómetro de Nulo Posiblemente se trata del más conocido de los dispositivos elipsométricos, dada su relativa sencillez y su adecuación al trabajo manual, previo a la automatización de la era informática. Está basado en la determinación de los ángulos acimutales de los componentes del PSG (Polarizador) y del PSA (Compensador y Analizador) para los cuales se extingue el flujo luminoso de salida (intensidad recibida por el detector). La forma de trabajo de éste elipsómetro es por reflexión, ya que los cálculos se realizan por medio de la relación entre los coeficientes de reflexión de los dos estados ortogonales de polarización, P y S. Además de los tres ángulos acimutales (correspondientes al polarizador, al compensador y al analizador), el retardo introducido por el compensador es el parámetro libre, que puede ser ajustado para encontrar la condición de extinción o de nulo, siempre y cuando se utilice un compensador variable. Considerando el coeficiente $\nu_C = e^{i\delta}$ para un compensador ideal, la condición de nulo implica:

$$\rho = \frac{r_P}{r_S} = \frac{V_x}{V_y} = \tan \Psi e^{i\Delta} = -\tan A \left[\frac{\tan C + \nu_C \tan(P - C)}{1 - \nu_C \tan C \tan(P - C)} \right]$$
(2.106)

donde P, C y A son los acimuts del polarizador, el compensador y el analizador, y $\Psi = \arctan(|r_P|/|r_S|)$ y $\Delta = \delta_P - \delta_S$ son los ángulos elipsométricos. El montaje del dispositivo puede variar, situando el compensador antes de la muestra. El formalismo para este caso es semejante al expuesto en la referencia [2]. La característica principal de éste instrumento es su exactitud, que contrasta con su relativa sencillez.

- Elipsómetros Rotatorios De configuración semejante al elipsómetro de Nulo, los elipsómetros Rotatorios están diseñados para la medida haciendo uno de los elementos rotatorios. Así tenemos elipsómetros de Analizador, Compensador o Polarizador Rotatorio. La velocidad de adquisición de datos para estos dispositivos, igual que para todos los que tienen elementos rotatorios, depende de la velocidad de rotación de tales elementos. No obstante, de las tres configuraciones la más aconsejable es la de Compensador Rotatorio, ya que la ausencia de movimiento en Polarizador y Analizador hace que el dispositivo no sea sensible a la polarización emitida por la fuente ni a la sensibilidad del detector a la polarización.
- Elipsometría Espectroscópica y Generalizada A los modelos de elipsómetro enumerados, se puede añadir una variación de los mismos, consistente en la medida progresiva de los ángulos elipsométricos para distintas longitudes de ónda, mediante la adición de una fuente policromáti-

ca (típicamente luz blanca, cuyo arco de espectro es muy continuo) y un monocromador que seleccione cada longitud de onda para realizar la medida. Esta es la llamada Elipsometría Espectroscópica, que amplía la información del comportamiento de los materiales para todas las longitudes de onda que sea capaz de seleccionar el monocromador.

La denominada Elipsometría Generalizada en algunas referencias, es mucho más compleja. En ella se utilizan configuraciones con dos retardadores, capaces de arrojar información acerca de la práctica totalidad de la matriz de Mueller. Puede ser considerada, por tanto, en la sección de Polarimetría.

Scatterómetros Pese a que no son elipsómetros como tal, resulta conveniente introducir el término de Scatterómetro por el frecuente uso que se ha hecho de este tipo de dispositivos ([76, 60, 107]). Entre sus ventajas cabe destacar el control preciso de los ángulos de incidencia y difusión, su versatilidad y la cantidad de información que pueden ofrecer en sistemas que presentan algún tipo de simetría (reducción de parámetros en la matriz de Mueller [5]). La configuración más habitual para un Scatterómetro es utilizar un polarizador como PSG y un analizador como PSA, ambos situados alineados o con polarizaciones cruzadas. Es decir, se introduce en el sistema una onda tipo S (tipo P) y se analiza la señal tipo S (tipo P) recibida, o bien se introduce una onda tipo S (tipo P) y se analiza la señal tipo P (tipo S). La primera de las configuraciones mide la intensidad Co-Polarizada, mientras la segunda de ellas mide la intensidad Cross-Polarizada (resultante de la medida de estados de polarización cruzados). Es obvio que el análisis de los vectores de Stokes de entrada y salida en los estados de polarización ortonormales da lugar al conocimiento de los parámetros m_{00} , m_{01} , m_{10} y m_{11} de la matriz de Mueller asociada al medio, y del grado de polarización lineal P_L de la luz emergente. Estos dispositivos son de gran ayuda en medidas astronómicas por la aparición de una zona característica de $P_L < 0$ (Negative Polarization Branch) en la región de backscattering para cometas y satélites [49].

Medida de parámetros específicos: Es de destacar que, dado que la luz introducida es linealmente polarizada, P_L en el haz emergente informa acerca de la pérdida de polarización lineal de la luz debida al medio. Pese a que ésta es la configuración más habitual, el uso de otros estados propios de polarización ortonormales mediante la adición de retardadores puede ofrecer más posibilidades para la medida de distintos parámetros de interés de la matriz de Mueller.

A modo de ejemplo, en la referencia [14] se ha simulado el sistema compuesto por una nanopartícula sobre sustrato mediante el DDA. Los resultados obtenidos en incidencia normal sobre el sustrato muestran que P_L medida a un ángulo de scattering de 90⁰ informa acerca del tipo de sustrato y de la distancia relativa entre ambos. Esta técnica, susceptible de ser implementada en un scatterómetro, constituiría un complemento a los avances realizados en microscopía en los últimos años [87].

Polarímetros

Tal y como se ha definido la Elipsometría, el máximo total de parámetros que se puede obtener mediante una medida elipsométrica es igual al número de parámetros que pueden determinar las características de la elipse de polarización. Sin embargo, para el análisis de sistemas complejos es imprescindible conocer el comportamiento de éstos frente a cualquier tipo de luz incidente. He ahí donde reside la potencia de trabajo de la Polarimetría: La Scatterometría y la Elipsometría Generalizada aumentan la capacidad de descripción del medio en cuestión, pero es la Polarimetría la que obtiene información acerca de los 16 elementos de la matriz de Mueller.

La polarimetría es el siguiente paso en la búsqueda de la interpretación de las propiedades físicas y morfológicas de los medios ópticos mediante el análisis de las características de la luz emergente de estos medios. El esquema general de un polarímetro es igual al presentado en la fig. 2.10, es decir, básicamente igual al de un elipsómetro. La diferencia fundamental es que la determinación de las magnitudes elipsométricas requiere de unas pocas medidas, en comparación con el número mínimo de 16 medidas que, en el mejor de los casos (sistema compatible determinado), son necesarias para obtener los 16 parámetros de la matriz de Mueller $(M_{4\times 4})$. Lógicamente, las simetrías en los medios difusores

ayudarán a reducir el número necesario de ecuaciones para resolver el sistema, pero esto no implica que, para la resolución del problema inverso, no sea necesaria la caracterización (sin información previa del sistema) de todos los parámetros de la matriz de Mueller. Para el desarrollo de esta memoria se han utilizado dos configuraciones polarimétricas bien diferenciadas, de las cuales se procederá a hacer una breve descripción teórica.

Polarímetro de Stokes (SP) Se ha adoptado este nombre debido a que la base del funcionamiento de este polarímetro consiste en la generación de sucesivos estados de polarización, que conforman una base del espacio de vectores de Stokes. El haz emergente es analizado midiendo su intensidad tras atravesar el PSA en las distintas configuraciones generadas por el PSG. La realización de una medida polarimétrica de este tipo implica la generación de una base de estados de polarización, es decir, utilizar el PSG para la construcción de 4 vectores de Stokes $\{\mathbf{s_i}\}_{i=1}^4$ ortogonales y linealmente independientes. Si se considera que el PSG está compuesto por un polarizador lineal de entrada, idealmente caracterizado por su acimut α_1 , y por un retardador, caracterizado por su desfase δ_1 y acimut ϕ_1 , los estados de polarización posibles del haz incidente en el medio se caracterizan por un vector de Stokes del tipo:

$$\mathbf{s}_{\mathbf{i}} = M_R(\phi_1, \delta_1) M_P(\alpha_1) \mathbf{s}_{\mathbf{f}} \tag{2.107}$$

donde $\mathbf{s_f}$ es el vector de Stokes del haz procedente de la fuente de iluminación, cuya intensidad es I_0 . Si el acimut del polarizador se sitúa en $\alpha_1 = 0^0$ (onda P), para un retardador que introduzca un desfase $\delta_1 = \pi/2$ el vector de Stokes del haz incidente es:

$$\mathbf{s_{in}} = I_0 \begin{pmatrix} 1\\ \cos^2 2\phi_1\\ \sin 2\phi_1 \cos 2\phi_1\\ \sin 2\phi_1 \end{pmatrix}$$
(2.108)

Una vez se han controlado las características polarimétricas del haz incidente, es necesario optimizar el PSA del dispositivo para conseguir conocer todos los elementos de la matriz de Mueller del medio en cuestión. Dada la configuración del PSG, la forma más fácil de obtener las características del medio es consiguiendo que el PSA compense los estados de polarización introducidos por el PSG. Para ello, el PSA estará compuesto por los mismos elementos que el PSG, pero en orden inverso. Esto es, debe estar formado por un retardador con desfase similar al del PSG, y por un polarizador lineal de idénticas características. De esta forma, el vector de Stokes del haz que llega al detector queda determinado por:

$$\mathbf{s_{out}} = I_0 \begin{pmatrix} 1 & \cos^2 2\phi_2 & \sin 2\phi_2 \cos 2\phi_2 & -\sin 2\phi_2 \\ 1 & \cos^2 2\phi_2 & \sin 2\phi_2 \cos 2\phi_2 & -\sin 2\phi_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} M_{4\times4} \begin{pmatrix} 1 \\ \cos^2 2\phi_1 \\ \sin 2\phi_1 \cos 2\phi_1 \\ \sin 2\phi_1 \end{pmatrix}$$
(2.109)

Suponiendo que se pueden controlar los acimuts de ambos retardadores (fig. 2.11(a)), el término $s_{out,1}$ que hace referencia a la intensidad recibida en el detector, es:

 $\dots + m_{23}\sin 2\phi_1 + m_{21}\cos 2\phi_1 + m_{22}\cos 2\phi_1\sin 2\phi_1)]$

donde los m_{ij} son los elementos de la matriz de Mueller asociada al medio óptico problema. La correcta elección del acimuts de ambos retardadores proporcionará la base de estados de polarización necesaria y suficiente para obtener el valor de todos los parámetros de la matriz de Mueller del medio mediante un conjunto mínimo de 16 medidas.



Figura 2.11: Configuración de los polarímetros utilizados para la elaboración de la memoria.

Polarímetro de Compensador Dual Rotatorio (DRCP) El fundamento teórico de este tipo de dispositivo fue expuesto por primera vez en [108, 109]. La viabilidad y aplicación de ésta técnica ha sido puesta de manifiesto en [110] y una serie de referencias posteriores sobre las que se hablará en el capítulo 4. El esquema de funcionamiento del DRCP responde al montaje responde al gráfico de la fig. 2.11(b). El haz que llega a la muestra se caracteriza por un vector de Stokes $\mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_0 & p_1 & p_2 & p_3 \end{bmatrix}^T$. La matriz del PSA es:

$$\mathbf{A} = (a_{ji}) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^0 \\ \mathbf{A}^1 \\ \mathbf{A}^2 \\ \mathbf{A}^3 \end{pmatrix}$$
(2.111)

donde $\mathbf{A}^{j} = \begin{bmatrix} a_{j0} & a_{j1} & a_{j2} & a_{j3} \end{bmatrix}$ es el vector fila *j-ésimo* de la matriz del PSA. El flujo luminoso total que llega al detector, determinado por el parámetro s_0 del vector de Stokes del haz emergente del sistema, quedará determinado por:

$$I = s_0 = \mathbf{A}^0 M \mathbf{P} = \sum_{i,j=0}^3 a_{0i} p_j m_{ij} = \sum_{i,j=0}^3 \mu_{ij} m_{ij}$$
(2.112)

Los elementos de la matriz μ_{ij} determinan el peso con el que cada uno de los correspondientes m_{ij} de la matriz de Mueller a analizar contribuye al total de la intensidad detectada. La matriz μ da una representación concisa y completa de cualquier tipo de polarímetro cuyo esquema sea PolarizadorRetardador-RetardadorAnalizador (el SP también puede expresarse en términos de μ_{ij}). Si se aplica una modulación tanto al PSG como al PSA, la matriz μ se verá afectada por dicha modulación. Supongamos que se introduce una modulación a frecuencias discretas ω_k . La matriz μ puede ser descrita en términos de su transformada de Fourier como:

$$\mu = \sum_{k} \left(\mu_k^A \cos \omega_k t + \mu_k^B \sin \omega_k t \right)$$
(2.113)

ecuación que puede ser sustituida en la ec. 2.112 obteniendo como resultado:

$$\begin{cases} I = \sum_{k} (A_k \cos \omega_k t + B_k \sin \omega_k t) \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix} = \sum_{i,j=0}^{3} \begin{pmatrix} \mu_{kij}^A \\ \mu_{kij}^B \end{pmatrix} m_{ij} \end{cases}$$
(2.114)

donde A_k y B_k son las amplitudes de Fourier de la intensidad (I) de frecuencia ω_k . Para un polarímetro dado, μ puede determinarse mediante la 2.112, y para una modulación dada, $\mu_k^{A,B}$

puede, por lo tanto, ser determinado. El DRCP también es denominado polarímetro de Fourier, haciendo referencia a la transformada de Fourier que se lleva a cabo, o polarímetro de retardador dual rotatorio [111], al utilizar el término retardador en lugar de compensador. Para obtener mediante el DRCP los 16 elementos de la matriz de Mueller de la muestra, la modulación debe producir una señal de, al menos, 16 amplitudes de Fourier independientes. Obtener 16 amplitudes de Fourier independientes requiere de un mínimo de ocho armónicos ω_k diferentes (k = 1, 2, ..., 8). La realización de una medida sobre un elemento óptico conocido, o en vacío (matriz identidad), permitirá realizar la calibración tanto del PSG como del PSA (fijando angulos acimutales, transmitancias y desfases).

Formalismo Medio Óptico	Jones	Mueller
Vacío	$\left(\begin{array}{cc}1&0\\0&1\end{array}\right)$	$\left(\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$
$\frac{\text{Medio Absorbente}}{(a)}$	$\left(\begin{array}{cc}a&0\\0&a\end{array}\right)$	$\left(\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$
$\frac{\text{Polarizador Lineal}}{(0^0)}$	$\left(\begin{array}{cc}1&0\\0&0\end{array}\right)$	$rac{1}{2} egin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \ 1 & 1 & 0 & 0 \ 0 & 0 & 0 & 0 \ 0 & 0 & 0 & 0$
$\frac{\text{Polarizador Lineal}}{(\alpha)}$	$\left(egin{array}{ccc} c_lpha^2 & s_lpha c_lpha \ s_lpha c_lpha & s_lpha^2 \ \end{array} ight)$	$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & c_{2\alpha} & s_{2\alpha} & 0\\ c_{2\alpha} & c_{2\alpha}^2 & s_{2\alpha}c_{2\alpha} & 0\\ s_{2\alpha} & s_{2\alpha}c_{2\alpha} & s_{2\alpha}^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\frac{\text{Diatenuador Lineal Alineado}}{(p_1, p_2)}$	$\left(\begin{array}{cc} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{array}\right)$	$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} T(p) & R(p) & 0 & 0 \\ R(p) & T(p) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2p_1p_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2p_1p_2 \end{pmatrix}$
$\frac{\text{Diatenuador Elíptico (Puro)}}{(p_1, p_2, \alpha, \beta)}$	$ \begin{pmatrix} p_1 c_{\alpha}^2 + p_2 s_{\alpha}^2 & c_{\alpha} s_{\alpha} e^{-i\delta} (p_1 - p_2) \\ c_{\alpha} s_{\alpha} e^{-i\delta} (p_1 - p_2) & p_1 s_{\alpha}^2 + p_2 c_{\alpha}^2 \end{pmatrix} $	$ \begin{array}{c} \begin{array}{c} T(p) & c_{2\alpha}R(p) & c_{\delta}s_{2\alpha}R(p) & s_{\delta}s_{2\alpha}R(p) \\ c_{2\alpha}R(p) & c_{2\alpha}^2T(p) + 2p_1p_2s_{2\alpha}^2 & \Upsilon_6 & \Upsilon_8 \\ c_{\delta}s_{2\alpha}R(p) & \Upsilon_5 & \Upsilon_1 & \Upsilon_2 \\ s_{\delta}s_{2\alpha}R(p) & \Upsilon_7 & \Upsilon_3 & \Upsilon_4 \end{array} \right) $
$\frac{\text{Retardador Lineal}}{(0^0, \delta)}$	$\left(egin{array}{cc} e^{i\delta/2} & 0 \ 0 & e^{-i\delta/2} \end{array} ight)$	$\left(egin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 & 0 \ 0 & 0 & c_{\delta} & s_{\delta} \ 0 & 0 & -s_{\delta} & c_{\delta} \end{array} ight)$
$\frac{\text{Retardador Lineal}}{(\varphi, \delta)}$	$ \begin{pmatrix} c_{\varphi}^2 e^{i\delta/2} + s_{\varphi}^2 e^{-i\delta/2} & (e^{i\delta/2} - e^{-i\delta/2})s_{\varphi}c_{\varphi} \\ (e^{i\delta/2} - e^{-i\delta/2})s_{\varphi}c_{\varphi} & s_{\varphi}^2 e^{i\delta/2} + c_{\varphi}^2 e^{-i\delta/2} \end{pmatrix} $	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{2\varphi}^2 + c_{\delta} s_{2\varphi}^2 & (1 - c_{\delta}) s_{2\varphi} c_{2\varphi} & -s_{\delta} s_{2\varphi} \\ 0 & (1 - c_{\delta}) s_{2\varphi} c_{2\varphi} & s_{2\varphi}^2 + c_{\delta} c_{2\varphi}^2 & s_{\delta} c_{2\varphi} \\ 0 & s_{\delta} s_{2\varphi} & -s_{\delta} c_{2\varphi} & c_{\delta} \end{pmatrix}$
$\frac{\text{Retardador Elíptico Ideal (Puro)}}{(\varphi, \delta, \psi)}$	$ \left(\begin{array}{c} c_{\varphi}^2 e^{i\delta/2} + s_{\varphi}^2 e^{-i\delta/2} & (e^{i\delta/2} - e^{-i\delta/2})s_{\varphi}c_{\varphi}e^{-i\psi} \\ (e^{i\delta/2} - e^{-i\delta/2})s_{\varphi}c_{\varphi}e^{i\psi} & s_{\varphi}^2 e^{i\delta/2} + c_{\varphi}^2 e^{-i\delta/2} \end{array}\right) $	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{2\varphi}^2 + \frac{1}{2}c_{\delta}s_{2\varphi}^2 & c_{\psi}\Omega_{\varphi} + \frac{1}{2}s_{2\varphi}s_{\delta}s_{\psi} & s_{\psi}\Omega_{\varphi} - \frac{1}{2}s_{2\varphi}s_{\delta}c_{\psi} \\ 0 & c_{\psi}\Omega_{\varphi} - \frac{1}{2}s_{2\varphi}s_{\delta}s_{\psi} & \Lambda_{1} & \Lambda_{2} \\ 0 & s_{\psi}\Omega_{\varphi} + \frac{1}{2}s_{2\varphi}s_{\delta}c_{\psi} & \Lambda_{3} & \Lambda_{4} \end{pmatrix}$
$\frac{\text{Retardador Elíptico Real}}{(k_1, k_2, \varphi, \delta, \psi)}$	$ \begin{pmatrix} c_{\varphi}^{2}k_{1}e^{i\delta/2} + s_{\varphi}^{2}k_{2}e^{-i\delta/2} & (k_{1}e^{i\delta/2} - k_{2}e^{-i\delta/2})s_{\varphi}c_{\varphi}e^{-i\psi} \\ (k_{1}e^{i\delta/2} - k_{2}e^{-i\delta/2})s_{\varphi}c_{\varphi}e^{i\psi} & s_{\varphi}^{2}k_{1}e^{i\delta/2} + c_{\varphi}^{2}k_{2}e^{-i\delta/2} \end{pmatrix} $	$\begin{bmatrix} T(k) & c_{2\varphi}R(k) & c_{\psi}s_{2\varphi}R(k) & s_{\psi}s_{2\varphi}R(k) \\ c_{2\varphi}R(k) & c_{2\varphi}^{2}T(k) + 2k_{1}k_{2}c_{\delta}s_{2\varphi}^{2} & \Xi_{6} & \Xi_{8} \\ c_{\psi}s_{2\varphi}R(k) & \Xi_{5} & \Xi_{1} & \Xi_{2} \\ s_{\psi}s_{2\varphi}R(k) & \Xi_{7} & \Xi_{3} & \Xi_{4} \end{bmatrix}$
Despolarizador Ideal	∄	$\left(\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$
$\frac{\text{Despolarizador Parcial}}{(d_1, d_2, d_3)}$	∄	$\left(\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$
$\frac{\text{Despolarizador Real}}{(d_i, a_i, z_i)}$	⊉	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ z_1 & d_1 & a_1 & a_2 \\ z_2 & a_1 & d_2 & a_3 \\ z_3 & a_2 & a_2 & d_3 \end{pmatrix}$

 $\overline{c_x} \equiv \cos x, \ s_x \equiv \sin x, \ c_{2x} \equiv \cos 2x, \ s_{2x} \equiv \sin 2x, \ \Omega_x \equiv \frac{1}{2} s_{2x} c_{2x}, \ T(x) \equiv (x_1^2 + x_2^2), \ y \ R(x) \equiv (x_1^2 - x_2^2),$

 $\Upsilon_1 \equiv c_{\delta}^2 (s_{2\alpha}^2 T(p) + 2p_1 p_2 c_{2\alpha}^2) + 2p_1 p_2 s_{\delta}^2, \quad \Upsilon_4 \equiv s_{\delta}^2 (s_{2\alpha}^2 T(p) + 2p_1 p_2 c_{2\alpha}^2) + 2p_1 p_2 c_{\delta}^2,$

 $\Upsilon_2 \equiv \Upsilon_3 \equiv s_\delta c_\delta(s_{2\alpha}^2 T(p) + 2p_1 p_2 c_{2\alpha}^2) + 2p_1 p_2 c_\delta s_\delta,$

 $\Upsilon_5 \equiv \Upsilon_6 \equiv c_\delta(s_{2\alpha}c_{2\alpha}T(p) - 2s_{2\alpha}c_{2\alpha}p_1p_2), \quad \Upsilon_7 \equiv \Upsilon_8 \equiv s_\delta(s_{2\alpha}c_{2\alpha}T(p) - 2s_{2\alpha}c_{2\alpha}p_1p_2),$

$$\Lambda_1 \equiv (s_{\psi}(\frac{1}{2}c_{\delta}s_{\psi} + \frac{1}{2}c_{\psi}s_{\delta}c_{2\varphi})) + (c_{\psi}(c_{\psi}(\frac{1}{2}c_{\delta}c_{2\varphi}^2 + s_{2\varphi}^2) - \frac{1}{2}s_{\delta}s_{\psi}c_{2\varphi})),$$

$$\begin{split} &\Lambda_{2} \equiv (c_{\psi}(s_{\psi}(\frac{1}{2}c_{\delta}c_{2}^{2}\varphi + s_{2}^{2}\varphi) + \frac{1}{2}c_{\psi}s_{\delta}c_{2}\varphi)) - (s_{\psi}(\frac{1}{2}c_{\delta}v - \frac{1}{2}s_{\delta}s_{\psi}c_{2}\varphi)), \\ &\Lambda_{3} \equiv (s_{\psi}(c_{\psi}(\frac{1}{2}c_{\delta}c_{2}^{2}\varphi + s_{2}^{2}\varphi) - \frac{1}{2}s_{\psi}s_{\delta}c_{2}\varphi)) - (c_{\psi}(\frac{1}{2}c_{\delta}s_{\psi} + \frac{1}{2}s_{\delta}c_{\psi}c_{2}\varphi)), \\ &\Lambda_{4} \equiv (c_{\psi}(\frac{1}{2}c_{\delta}c_{\psi} - \frac{1}{2}s_{\psi}s_{\delta}c_{2}\varphi)) + (s_{\psi}(s_{\psi}(\frac{1}{2}c_{\delta}c_{2}^{2}\varphi + s_{2}^{2}\varphi) + \frac{1}{2}s_{\delta}c_{\psi}c_{2}\varphi)), \\ &\Xi_{1} \equiv (s_{\psi}(2k_{1}k_{2}c_{\delta}s_{\psi} + 2k_{1}k_{2}c_{\psi}s_{\delta}c_{2}\varphi)) + (c_{\psi}(c_{\psi}(2k_{1}k_{2}c_{\delta}c_{2}^{2}\varphi + T(k)s_{2}^{2}\varphi) - 2k_{1}k_{2}s_{\delta}s_{\psi}c_{2}\varphi)), \\ &\Xi_{1} \equiv (c_{\psi}(2k_{1}k_{2}c_{\delta}s_{\psi} + 2k_{1}k_{2}c_{\psi}s_{\delta}c_{2}\varphi)) + (c_{\psi}(c_{\psi}(2k_{1}k_{2}c_{\delta}c_{2}^{2}\varphi + T(k)s_{2}^{2}\varphi) - 2k_{1}k_{2}s_{\delta}s_{\psi}c_{2}\varphi)), \end{split}$$

 $\Xi_2 \equiv (c_{\psi}(s_{\psi}(2k_1k_2c_{\delta}c_{2\varphi}^2 + T(k)s_{2\varphi}^2) + 2k_1k_2s_{\delta}c_{\psi}c_{2\varphi})) - (s_{\psi}(2k_1k_2c_{\delta}c_{\psi} - 2k_1k_2s_{\delta}s_{\psi}c_{2\varphi})),$

 $\Xi_{3} \equiv (s_{\psi}(c_{\psi}(2k_{1}k_{2}c_{\delta}c_{2\varphi}^{2} + T(k)s_{2\varphi}^{2}) - 2k_{1}k_{2}s_{\delta}s_{\psi}c_{2\varphi})) - (c_{\psi}(2k_{1}k_{2}c_{\delta}s_{\psi} + 2k_{1}k_{2}s_{\delta}c_{\psi}c_{2\varphi})),$

 $\Xi_4 \equiv (c_{\psi}(2k_1k_2c_{\delta}c_{\psi} - 2k_1k_2s_{\psi}s_{\delta}c_{2\varphi})) + (s_{\psi}(s_{\psi}(2k_1k_2c_{\delta}c_{2\varphi}^2 + T(k)s_{2\varphi}^2) + 2k_1k_2s_{\delta}c_{\psi}c_{2\varphi})),$

$$\begin{split} \Xi_5 &\equiv c_{\psi}(s_{2\varphi}c_{2\varphi}T(k) - 2s_{2\varphi}c_{2\varphi}k_1k_2) - 2s_{2\varphi}s_{\delta}s_{\psi}k_1k_2, \quad \Xi_6 \equiv c_{\psi}(s_{2\varphi}c_{2\varphi}T(k) - 2s_{2\varphi}c_{2\varphi}k_1k_2) + 2s_{2\varphi}s_{\delta}s_{\psi}k_1k_2, \\ \Xi_7 &\equiv s_{\psi}(s_{2\varphi}c_{2\varphi}T(k) - 2s_{2\varphi}c_{2\varphi}k_1k_2) + 2s_{2\varphi}s_{\delta}c_{\psi}k_1k_2, \quad \Xi_8 \equiv s_{\psi}(s_{2\varphi}c_{2\varphi}T(k) - 2s_{2\varphi}c_{2\varphi}k_1k_2) - 2s_{2\varphi}s_{\delta}c_{\psi}k_1k_2. \end{split}$$

Tabla 2.1: Representación matricial de sistemas ópticos

Capítulo 3

Fundamentos del Método de Descomposicíon Polar (PD)

Como ya se ha visto (sección 2.3.1), la matriz de Mueller que caracteriza un sistema difusor, para un perfil espectral y para una dirección de difusión, contiene toda la información que puede portar la luz difundida referente al sistema en cuestión. La dependencia angular de los elementos de ésta matriz suele estudiarse representando la evolución de cada uno de ellos frente al ángulo de scattering [112]. Sin embargo, a pesar de que el grueso de las propiedades polarimétricas del sistema y, por tanto, de sus características físicas está contenido en los elementos de la matriz de Mueller, tanto el significado de cada uno de ellos como su relación con el resto de elementos permanecen, generalmente, ocultos. Esta es la razón por la que, en los últimos años, se han propuesto diferentes métodos para simplificar la interpretación física de este formalismo matricial, introduciendo una serie de parámetros independientes apropiados para la resolución e interpretación de la matriz de cada problema [113, 114]. Uno de éstos es el método de Descomposición Polar (PD), que reduce el número de parámetros necesarios hasta el mínimo de ellos suficiente para representar el sistema, introduciendo magnitudes independientes con sentido físico, de fácil manejo, y que ayudan a comprender los procesos que tienen lugar en sistemas difusores complejos.

Este capítulo tiene dos partes bien diferenciadas. La primera contiene una exposición teórica del formalismo del PD. En ella se abordarán los principios fundamentales y su aplicación a los distintos tipos de sistemas, así como una serie de discusiones acerca del método de aplicación. La segunda parte muestra los resultados teóricos procedentes de la aplicación del PD en distintos sistemas simulados mediante DDA (sección 2.2.1, pg. 22). Esto último proporciona un test de aplicabilidad del método, es decir, una vía segura para comprobar su posible aplicación en los distintos situaciones experimentales.

3.1. Principios Fundamentales

El manejo del álgebra matricial [115] y el formalismo de las matrices de Pauli [16, 89] se torna imprescindible para exponer cómo funciona el PD. Supongamos un medio que no introduce efectos incoherentes en la luz que incide sobre él (eso permite utilizar el formalismo de Jones o el de Mueller para representarlo). Si el sistema está representado por la matriz V, el PD indica que puede ser descompuesto en la forma:

$$V = UH \tag{3.1}$$

donde H es una matriz hermítica y U es una matriz unitaria. Ambas son denominadas factores polares de V por su analogía con la formulación polar de los números complejos. Pese a esta analogía, a diferencia de lo que ocurre con los números complejos, los factores polares matriciales no suelen ser conmutables: La descomposición V = H'U' en dos nuevas matrices H' y U' no conmuta, dado que la matriz unitaria coincide, U' = U, y la hermítica, que cumple la igualdad $H' = UHU^{-1}$, generalmente verifica que $H' \neq H$. No obstante, es equivalente aplicar el PD de cualquiera de las dos formas, teniendo en cuenta, lógicamente, que las variables de las que dependen H y U no tienen por qué ser las mismas que las variables de las que dependen U' y H' [116]. La noción de Descomposición Polar es conocida en algebra lineal, pero hasta los últimos años no ha gozado de aplicación plena en el campo de la óptica. La matriz unitaria U no altera el grado de polarización del sistema (pg. 29), sin embargo la matriz hermítica H puede presentar diatenuación, que podría entenderse como una despolarización por absorción selectiva y que nada tiene que ver con la despolarización por falta de correlación, o despolarización por superposición incoherente de estados.

Las transformaciones matriciales que introducen U y H se pueden asociar con distintos elementos ópticos cotidianos. La matriz U introduce una rotación del vector \mathbf{u} , que representa el estado de polarización en la esfera de Poincaré (fig. 2.9(b), pg. 27). Si la rotación es en sentido del ángulo acimutal χ , el elemento óptico equivalente es un rotor, mientras que si ocurre en sentido del ángulo ε , la matriz U corresponderá a un retardador lineal alineado. Cualquier rotación combinada representará un retardador lineal no alineado. La matriz H, por su parte, se corresponde con un polarizador general o diatenuador. Si H es singular, representa un polarizador lineal. De lo contrario, representará un diatenuador elíptico.

Existen una serie de teoremas ampliamente utilizados en el tratamiento de sistemas no despolarizantes, que resultan de utilidad en la aplicación del PD [16, 96, 91]:

- 1. Un sistema V que no introduzca efectos incoherentes en la luz que incide sobre él, es equivalente a un retardador (representado por la matriz U) seguido de un polarizador (representado por la matriz H). Este teorema equivale al PD.
- 2. Existe una única matriz H que cumple la ec. 3.1. La matriz U es única sí y sólo sí H no es singular, es decir, la matriz U no es única si H es un polarizador lineal.
- 3. Un retardador U es equivalente a un rotor seguido por un retardador lineal.

$$U = M_R(\varphi, \delta, \theta) = M_R(\varphi, \delta) M_G(\theta) = M_G(-\varphi) M_R(\delta) M_G(\varphi) M_G(\theta)$$
(3.2)

- 4. Cualquier retardador U puede ser generado por dos retardadores.
- 5. Cualquier polarizador H puede ser generado por un polarizador lineal y dos retardadores.
- 6. Un sistema V no despolarizante puede ser generado por un polarizador lineal, dos retardadores y un rotor.
- 7. De forma equivalente, un sistema V no despolarizante puede ser generado por un polarizador lineal y tres retardadores.
- 8. Un sistema V compuesto sólo por polarizadores lineales y rotores, puede ser sustituido por un sistema conformado por un polarizador lineal y un rotor.
- 9. Dos retardadores lineales alineados no pueden sustituir a un retardador cuyo vector \mathbf{u} (pg. 27) se encuentre fuera del plano ecuatorial (definido por los ejes \mathbf{s}_1 y \mathbf{s}_2).
- 10. Si la matriz de Jones de un sistema óptico cuando la luz lo traviesa en un cierto sentido es J, la matriz de Jones del sistema cuando la luz lo atraviesa en sentido opuesto es J^T .
- 11. Del mismo modo, si la matriz de Mueller del anterior sistema óptico cuando la luz lo traviesa en un cierto sentido es M, la matriz de Mueller cuando la luz lo atraviesa en sentido opuesto es M'.
- 12. Teorema General de Equivalencia (TGE): Si M es la matriz de Mueller asociada a un medio no despolarizante, existe un sistema equivalente compuesto por un rotor $M_G(\theta)$, un retardador lineal $M_R(\varphi_1, \delta_1)$, un diatenuador $M_D(p_1, p_2, \alpha, 0)$ y un retardador lineal $M_R(\varphi_2, \delta_2)$.
- 13. Cualquier retardador elíptico puro es equivalente a un retardador lineal situado entre dos retardadores lineales alineados:

$$U = M_R(\varphi, \delta, \psi) = M_R(-\psi)M_R(\varphi, \delta)M_R(\psi) = M_R(-\psi)M_G(-\varphi)M_R(\delta)M_G(\varphi)M_R(\psi)$$
(3.3)

14. Cualquier diatenuador elíptico puro es equivalente a un diatenuador lineal situado entre dos retardadores lineales alineados:

$$H = M_D(p_1, p_2, \alpha, \beta) = M_R(-\beta)M_D(p_1, p_2, \alpha)M_R(\beta) = \cdots$$

$$\cdots = M_R(-\beta)M_G(-\alpha)M_D(p_1, p_2)M_G(\alpha)M_R(\beta)$$
(3.4)

15. En base al PD, si V es la matriz asociada a un medio no despolarizante, el número máximo de parámetros que describen el sistema viene determinado por el número máximo de parámetros que describen completamente las matrices de los factores polares $U ext{ y } H$, con:

$$U = M_R(\varphi, \delta, \rho) \quad y \quad H = M_D(p_1, p_2, \alpha, \beta) \tag{3.5}$$

donde se ha elegido el orden de la ec. 3.1 por concretar.

- 16. A partir de los puntos anteriores se deduce que el número máximo de parámetros necesarios para describir un sistema no despolarizante, tanto en el formalismo de Jones como en el de Mueller, son 7.
- 17. El punto 3 y el 13 son equivalentes y mantienen el número de parámetros que describen al sistema U, variando únicamente los límites en los que están definidos y el significado físico de los mismos.

3.1.1. Criterio de Coherencia

A priori, cualquier matriz 4×4 resultante de una medida experimental podría ser considerada una matriz de Mueller válida, una vez se hayan probado las condiciones de transmitancia (ec. 3.11). La aplicación del criterio de pureza serviría para discernir qué matrices son o no despolarizantes, pero no sería una condición necesaria y suficiente para saber si una matriz es físicamente realizable. La condición para que una matriz de Mueller sea físicamente realizable, es decir, la condición necesaria y suficiente para considerar como matriz de Mueller de un sistema una matriz 4×4 es la denominada condición de Coherencia o condición de Cloude [117]. Una matriz de Mueller experimental M, con independencia del ruido o margen de error que presenten sus elementos, será físicamente realizable sí y solo sí su matriz de Coherencia $T_{4\times 4}$ asociada es hermítica semi-definida positiva y cumple las condiciones de transmitancia (ec. 3.11). Para ello $T_{4\times 4}$ debe presentar cuatro autovalores λ_i , con $i = 1, \dots, 4$, reales mayores o iguales a cero, y cuatro vectores propios ortogonales asociados a estos valores propios. La matriz $T_{4\times 4}$ se corresponde de forma unívoca con la matriz de Mueller M, y se puede calcular a partir de los elementos m_{ij} de M según la siguiente relación:

	$m_{00}+m_{11}+m_{22}+m_{33}$	$m_{01} + m_{10} - i(m_{23} - m_{32})$	$m_{02} + m_{20} + i(m_{13} - m_{31})$	$m_{03}+m_{30}-i(m_{12}-m_{21})$	
T	$m_{01} + m_{10} + i(m_{23} - m_{32})$	$m_{00} + m_{11} - m_{22} - m_{33}$	$m_{12} + m_{21} + i(m_{03} - m_{30})$	$m_{13} + m_{31} - i(m_{02} - m_{20})$	(3.6)
14×4-	$m_{02} + m_{20} - i(m_{13} - m_{31})$	$m_{12} + m_{21} - i(m_{03} - m_{30})$	$m_{00} - m_{11} + m_{22} - m_{33}$	$m_{23} + m_{32} + i(m_{01} - m_{10})$	(0.0)
	$m_{03}+m_{30}+i(m_{12}-m_{21})$	$m_{13} + m_{31} + i(m_{02} - m_{20})$	$m_{23} + m_{32} - i(m_{01} - m_{10})$	$m_{00} - m_{11} - m_{22} + m_{33}$	

Haciendo uso de matrices teóricas se puede comprobar como, determinadas matrices que cumplen las condiciones de transmitancia (ec. 3.11) y cuyo grado de pureza este comprendido entre 0 y 1, pueden no corresponderse con matrices de Mueller físicamente realizables. A modo de ejemplo, en la tabla 3.1 se presentan dos matrices, $A ext{ y } B$, de las cuales sólo la A cumple la condición de Coherencia y, por tanto, sólo la A es una matriz de Mueller físicamente realizable. Toda medida experimental, por tanto, debe someterse al criterio de Coherencia para asegurar su validez, como paso previo a cualquier otro tipo de análisis.

	A	В		
Matrices	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0\\ 0,0 & 0,0 & 0,1 & 0,1\\ 0,0 & 0,1 & 0,0 & 0,0\\ 0,0 & 0,1 & 0,0 & 0,0 \end{array}\right)$	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 0,5 & 0,2 \\ 0,0 & 0,5 & 0,0 & 0,0 \\ 0,0 & 0,2 & 0,0 & 0,0 \end{array}\right)$		
Grado de Pureza	0,0133	0,1933		
Matriz de Coherencia	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0\\ 0,0 & 1,0 & 0,2 & 0,2\\ 0,0 & 0,2 & 1,0 & 0,0\\ 0,0 & 0,2 & 0,0 & 1,0 \end{array}\right)$	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0\\ 0,0 & 1,0 & 1,0 & 0,4\\ 0,0 & 1,0 & 1,0 & 0,0\\ 0,0 & 0,4 & 0,0 & 1,0 \end{array}\right)$		
Autovalores	$ \left(\begin{array}{c} 0,72\\ 1,00\\ 1,28\\ 1,0 \end{array}\right) $	$ \left(\begin{array}{c} -0.08\\ 1.00\\ 2.08\\ 1.00 \end{array}\right) $		

Tabla 3.1: Aplicación de la condición de Coherencia a dos matrices teóricas.

Existe otros criterios con grado de aceptación razonable en el entorno científico [118, 119], pero cuyas restricciones son mucho más permisivas que las de la condición de Coherencia, por otro lado ampliamente utilizada [120, 106], que será la que utilice en la caracterización de todos los sistemas presentados en esta Tesis. En adelante nos referiremos a matrices de Mueller físicamente realizables, o con estricto sentido físico, siempre que estas cumplan la condición de Coherencia. Nuevos estudios comienzan a imponer condiciones más restrictivas [121], en cierto modo ligadas al criterio de coherencia, que serán de referencia para futuros trabajos.

3.1.2. Concepto de Pureza

Hasta el momento se ha puesto la condición de que los sistemas a los que se le va a aplicar el PD no introducen despolarización por efectos de incoherencia. No obstante, cuando se analiza un medio cualquiera no se está en condiciones, a priori, de afirmar si pertenece a este tipo de sistemas. En primer lugar, la siguiente condición es necesaria para que una matriz sea considerada matriz de Mueller de un sistema óptico [122]:

$$Tr(M^T M) \le 4m_{00}^2$$
 (3.7)

A partir de esta ecuación se puede definir una nueva magnitud, denominada Pureza o grado de Pureza de una matriz de Mueller M como:

$$P(M) = \sqrt{\frac{Tr(M^T M) - m_{00}^2}{3m_{00}^2}}$$
(3.8)

cuyos valores van de $0 \le P(M) \le 1$.

Una matriz es pura cuando P(M) = 1, en cuyo caso es susceptible de ser descompuesta según la ec. 3.1. Por contra, una matriz con P(M) = 0 representa un despolarizador total, cuyos elementos son todos iguales a 0 excepto m_{00} . Los casos intermedios corresponden a medios que introducen una despolarización parcial en la luz que incide sobre ellos.

Se denomina comúnmente criterio de pureza a la igualdad en la ec. 3.7 [116]:

$$Tr(M^T M) = 4m_{00}^2 \tag{3.9}$$

Son muchas y variadas las discusiones acerca de la aplicabilidad de este criterio [118, 95], sin embargo, ha sido probada su validez para matrices de Mueller físicamente aceptables [123], y goza de una amplia aceptación en la comunidad científica. Las controversias sobre este criterio (del mismo modo que podría ocurrir al tratar la definición de despolarización en el siguiente apartado) están basadas en la diferente definición o interpretación, en ocasiones confusa, de términos de gran importancia. Las matrices de Mueller son un conjunto de matrices incluido en el conjunto de matrices de Stokes, que transforman vectores de Stokes en vectores de Stokes. Cualquier matriz de Mueller es, por tanto, una matriz de Stokes. Sin embargo, la afirmación inversa no es verdadera. Las matrices de Stokes no satisfacen parte de las condiciones previas que deben satisfacer las matrices de Mueller, de tal forma que no tiene sentido aplicar el criterio de pureza sobre ellas.

Existen otras condiciones imprescindibles para caracterizar los sistemas susceptibles de ser descritos por matrices de Mueller puras. Las denominadas *condiciones de transmitancia* sirven de referencia para establecer cuales son matrices susceptibles de ser matemáticamente descompuestas como una combinación de matrices de Mueller puras. Las condiciones de transmitancia no son más que la aplicación del principio de conservación de la energía a los sistemas ópticos. Si se denomina g_f o g_r a la transmitancia máxima considerando todos los posibles estados de polarización incidente (donde los subíndices f y r hacen referencia al sentido directo, *forward*, o inverso, *reverse*, de la luz incidente), entonces:

$$\begin{cases} g_f = m_{00}(1 + |\mathbf{P}|) \\ g_r = m_{00}(1 + |\mathbf{D}|) \end{cases}$$
(3.10)

siendo \mathbf{P} y \mathbf{D} polarizancia y diatenuación (ec. 2.95), respectivamente. Es decir, la dirección r se obtiene intercambiando las posiciones del haz incidente y el emergente. Las condiciones de transmitancia para un sistema cualquiera son [124, 123]:

$$g_f \le 1, \quad \mathbf{y} \quad g_r \le 1 \tag{3.11}$$

que viene a decir que cualquier sistema difusor es considerado pasivo en el sentido de que no puede liberar más energía (de la frecuencia incidente) que la puesta en juego por el haz incidente, no pudiendo amplificar la cantidad de luz recibida.

En este punto se pueden analizar las magnitudes características de las matrices puras, que serán de utilidad en los apartados siguientes. Se define el desfase o retardo δ entre los estados propios de un retardador elíptico M_R como [98]:

$$\delta = \underbrace{\arccos\left(\frac{Tr(M_R)}{2} - 1\right)}_{3.3} = \underbrace{\arccos\left(\sqrt{(m_{R22} + m_{R33})^2 + (m_{R32} - m_{R23})^2} - 1\right)}_{3.2}$$
(3.12)

Del mismo modo, el giro introducido por un retardador elíptico M_R es:

$$\theta = \underbrace{\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{m_{R23} - m_{R32}}{m_{R22} + m_{R33}}\right)}_{3.2} \tag{3.13}$$

Finalmente, en un diatenuador elíptico puro $M_D(p_1, p_2, \alpha, \beta)$, diatenuación y polarizancia coinciden, es decir, $\mathbf{D} = \mathbf{P}$ y los parámetros característicos (magnitudes angulares y transmitancias de los estados propios) están relacionados con ambos vectores como sigue [91]:

$$\begin{cases} \alpha = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\sqrt{(m_{D20}^2 + m_{D30}^2)}}{m_{D10}}\right) = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\sqrt{(m_{D02}^2 + m_{D03}^2)}}{m_{D01}}\right) \\ \beta = \arctan\left(\frac{m_{D30}}{m_{D20}}\right) = \arctan\left(\frac{m_{D30}}{m_{D20}}\right) \\ p_1^2 = m_{D00}(1 + |\mathbf{D}|) \\ p_2^2 = m_{D00}(1 - |\mathbf{D}|) \end{cases}$$
(3.14)

La matriz de un diatenuador puro, en su sentido más general puede ser descrita del siguiente modo [98]:

$$M_D = T \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{D}^T \\ \mathbf{D} & m_D \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad m_D = \sqrt{1 - D^2} I_{3\times 3} + \left(1 - \sqrt{1 - D^2}\right) \mathbf{u}_D \mathbf{u}_D^T \tag{3.15}$$

donde $\mathbf{u}_D = \mathbf{D}/|\mathbf{D}|$ es el vector unitario en a dirección de \mathbf{D} , $T = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2)$ es la transmitancia total del sistema para luz despolarizada y $D = (p_1^2 - p_2^2)/(p_1^2 + p_2^2)$ es la diatenuación del sistema, es decir, la

relación entre las transmitancias de los estados propios. Lógicamente el número de grados de libertad o parámetros independientes necesarios para describir el diatenuador sigue siendo 4: $M_D(T, D_1, D_2, D_3)$, $M_D(m_{00}, m_{01}, m_{02}, m_{03})$, o bien, $M_D(p_1, p_2, \alpha, \beta)$.

3.1.3. Concepto de Despolarización

Una vez analizados los sistemas puros, se abre el interrogante sobre la posibilidad de aplicación del PD en aquellos que no lo son. En primer lugar es necesario definir y reconocer lo que se entiende por despolarización. En la referencia [92] aparecen una serie de comentarios de gran interés en ésta memoria, que se resumen a continuación. Las matrices de Mueller pueden ser clasificadas de acuerdo al comportamiento que presentan frente al vector de Stokes del haz incidente como:

- 1. Matrices no despolarizantes: Transforman vectores de Stokes completamente polarizados (P = 1) en vectores de Stokes completamente polarizados (P = 1), y pueden ser deducidas a partir de matrices de Jones (P(M) = 1).
- 2. Matrices pseudo-despolarizantes: Transforman vectores de Stokes completamente polarizados (P = 1) en vectores de Stokes completamente polarizados (P = 1), pero no pueden ser derivadas del formalismo de Jones (P(M) < 1). Su determinante es negativo (|M| < 0).
- 3. Matrices despolarizantes: Cualquiera con sentido físico que no se incluya en los dos grupos anteriores (P(M) < 1).

Según esta clasificación, las matrices no despolarizantes y las pseudo-despolarizantes no disminuyen P en los haces completamente polarizados. Sin embargo, para vectores de Stokes parcialmente polarizados pueden disminuir P. Por contra, las matrices despolarizantes pueden incrementar P para haces parcialmente polarizados. El primer grupo de matrices, es decir las correspondientes a sistemas puros o con equivalencia Jones-Mueller, es al que se ha hecho referencia como matrices que no introducen despolarización por incoherencia o matrices no despolarizantes en general.

En este punto es conveniente indicar brevemente lo que se entiende por efectos de incoherencia en polarimetría [125]. Cualquier suma aleatoria de estados de polarización podría considerarse como tal. Se podrían enumerar algunos ejemplos, según la incoherencia sea espacial o temporal:

- Un ejemplo de incoherencia espacial sería la suma de estados de polarización de la luz difundida por un sistema a través de una ventana de detección extensa. A cada punto de la ventana de detección llegaría una intensidad que dependería de la posición subjetiva del sistema respecto a este punto. El análisis polarimétrico de la intensidad total recibida en la ventana de detección (es decir, el análisis polarimétrico de la suma de todas las intensidades llegadas al mismo tiempo a cada uno de los puntos del detector) daría lugar a una suma incoherente de estados. De este razonamiento se desprende que, cuanto menor sea la ventana de detección, menor será la incoherencia espacial introducida. Esta incoherencia es la responsable de los efectos de despolarización en la medida de la difusión por superficies estáticas (generadoras de speckle).
- Por otra parte, podríamos hablar de incoherencia temporal en el caso del análisis polarimétrico de muestras en suspensión (bien sean aerosoles o suspensiones acuosas). En este caso la suma incoherente sería debida a la ventana de integración temporal del detector. El tiempo transcurrido en la toma de una lectura podría ser suficiente para que varias partículas de distinto tamaño o forma, o distintas configuraciones de agregados, difundieran luz sobre el detector. La intensidad total medida sería un promedio de todas las contribuciones llegadas al detector en el tiempo que estuvo realizando la medida. De nuevo tendríamos una suma incoherente de estados. Ni qué decir tiene que, también en casos de incoherencia temporal, habría una contribución de incoherencia espacial debida a la extensión de la ventana de detección.
- Finalmente, y aunque sea un fenómeno con una contribución sensiblemente menor que los anteriores, podríamos hablar de una incoherencia temporal debida a que el haz no es perfectamente monocromático. Como se comenta en la referencia [39] (pg. 31): La aditividad de los parámetros de Stokes (por ejemplo, ec. 2.93) nos permite generalizar el principio de equivalencia óptica para

una luz quasi-monocromática, de forma que es imposible (mediante el uso tradicional de instrumentos ópticos) distinguir entre la mezcla incoherente de haces monocromáticos que conforman un mismo vector de Stokes. Es por esto que el uso de un haz quasi-monocromático es una forma de introducir despolarización. En este sentido, es necesario resaltar los efectos de desplazamiento espectral (desplazamiento de Wolf [126]) que surgen en interfases rugosas debidos a la pérdida de coherencia espectral, dando lugar a un ensanchamiento en el espectro de luz difundida que varía con el ángulo de scattering [127].

Cualquiera de los tres tipos de matrices despolarizantes expuestos en la tabla 2.1 (pg. 38) se corresponden con matrices de medios despolarizantes. Un despolarizador lineal $M_{\Delta}(d_i)$ es aquel cuyos ejes principales se encuentran alineados con los ejes \mathbf{s}_i de la esfera de Poincaré (fig. 2.9(b)). Tal despolarizador presenta unos factores de despolarización $(1 - |d_i| \text{ con } i = 1, 2, 3)$, que describen la despolarización introducida a lo largo de esos ejes. Se puede definir la capacidad de despolarización como la media de los factores principales de despolarización [98]:

$$M_{\Delta}(d_i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & d_1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & d_2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & d_3 \end{pmatrix}, \quad y \quad \Delta = 1 - \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 |d_i|, \quad \text{con } 0 \le \Delta \le 1$$
(3.16)

En general, los ejes principales del despolarizador no tienen por qué coincidir con los ejes de la esfera de Poincaré. Por lo tanto, la matriz de despolarización de un medio despolarizador cuyos ejes principales sean arbitrarios será:

$$M_{\Delta}(d_i, a_i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_1 & a_1 & a_2 \\ 0 & a_1 & d_2 & a_3 \\ 0 & a_2 & a_3 & d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & m_{\Delta} \end{pmatrix},$$
(3.17)
$$\operatorname{con} \ m_{\Delta}^T = m_{\Delta} \quad y \quad \Delta = 1 - \frac{|Tr(m_{\Delta})|}{3} = 1 - \frac{|Tr(M_{\Delta}) - 1|}{3}$$

en la cual m_{Δ} es una matriz simétrica 3×3 . Los valores propios de m_{Δ} son sus factores principales de despolarización, y su capacidad de despolarización se podría calcular a partir de la ec. 3.16. No obstante, esta expresión únicamente presenta 6 grados de libertad. Además, como se comentó con anterioridad, un medio despolarizante puede presentar la capacidad de polarizar la luz de un haz incidente despolarizado. Esto únicamente será posible si la matriz del medio despolarizante presenta una determinada polarizancia, es decir, si después de despolarizar el haz incidente, actúa sobre él una matriz con una componente de polarizancia:

$$M_{\Delta}(d_i, a_i, z_i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ z_1 & d_1 & a_1 & a_2 \\ z_2 & a_1 & d_2 & a_3 \\ z_3 & a_2 & a_3 & d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{P}_{\Delta} & m_{\Delta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{P}_{\Delta} & I_{3\times3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & m_{\Delta} \end{pmatrix}$$
(3.18)

donde $\mathbf{P}_{\Delta} = \begin{bmatrix} z_1 & z_2 & z_3 \end{bmatrix}^T$. Es decir, la matriz de Mueller de un medio despolarizante, en general, presenta 9 grados de libertad: 3 asociados al retardo, 3 asociados a la diatenuación y 3 asociados a la diagonal [128]. Existen algunos ejemplos en la bibliografía que pueden ilustrar acerca de esta clase de sistemas, como por ejemplo el *polarizador lineal ideal sin pérdidas* [123], cuya matriz de Mueller es:

$$\left(\begin{array}{ccc|c}
1 & 0 & & \\
0 & & O_{2\times 2} \\
\hline
& & O_{2\times 2} & & O_{2\times 2}
\end{array}\right)$$

La matriz de polarizancia de la ec. 3.18 representaría un desplazamiento del vector de Stokes. De esta forma, el efecto de un despolarizador real sobre un vector de Stokes arbitrario en la esfera de Poincaré daría lugar a una deformación elipsoidal de la misma centrada en \mathbf{P}_{Δ} [92].

3.1.4. Descomposición Polar en Sistemas No Despolarizantes

Resulta directa la aplicación del PD a sistemas no despolarizantes. La única necesidad es fijar la metodología de trabajo ante la ambigüedad manifiesta que presenta el PD frente al orden de actuación de las matrices hermítica y unitaria. No obstante, la definición de diatenuador (ec. 3.15) deja claro que conocida la primera fila o columna de elementos de la matriz M del medio óptico analizado es inmediata la obtención de la matriz del diatenuador M_D [129], con independencia del orden en la descomposición que se elija. Una vez obtenida la matriz del diatenuador, se puede verificar:

$$\begin{cases}
MM_{D1}^{-1} = M_R M_{D1} M_{D1}^{-1} = M_R, & \text{si } M = M_R M_{D1} \\
M_{D2}^{-1} M = M_{D2}^{-1} M_{D2} M_R = M_R, & \text{si } M = M_{D2} M_R
\end{cases}$$
(3.19)

El resultado de la ec. 3.19 da lugar a la obtención de todos los parámetros ópticos libres del sistema, pues de la metodología anterior se desprenden tanto la matriz del diatenuador como la del retardador. Sólo en sistemas singulares, como un polarizador lineal, pueden presentarse indeterminaciones debido a que el determinante de la matriz de diatenuación es nulo y, por tanto, no presenta inversa. Esta situación, matemáticamente compleja, se torna físicamente trivial: Tras la obtención de la matriz de diatenuación correspondiente a un polarizador lineal, el retardador elíptico puro de características únicas queda perfectamente determinado por un mínimo de tres parámetros, tras realizar el producto $M_R \cdot M_D$.

Esta no es la única forma de resolución posible. Si se consideran las matrices del retardador y el diatenuador, $M_R(\varphi, \delta, \rho)$ y $M_D(p_1, p_2, \alpha, \beta)$, y se plantea la resolución del sistema:

$$M = M_R(\varphi, \delta, \rho) M_D(p_1, p_2, \alpha, \beta) = (m_{ij}), \quad i, j = 0, \dots, 3$$
(3.20)

se obtiene un conjunto de 16 ecuaciones y 7 incógnitas, que conforman un sistema compatible indeterminado. La resolución de este sistema por métodos simbólicos y numéricos en entornos matemáticos apropiados (MathCAD, MATLAB, ...) planteando unos límites de entrada para los valores de las transmitancias y de las magnitudes angulares puede ser, en ocasiones, muy recomendado para mantener la continuidad de las variables angulares en los análisis polarimétricos, así como para evitar las indeterminaciones en sistemas singulares. Las equivalencias existentes a la hora de construir un sistema óptico determinado (punto 17, pg. 41), que podrían jugar una mala pasada al realizar el análisis computacional, desaparecen mediante este protocolo de aplicación del PD.

En resumen, el orden de aparición del diatenuador o el retardador en el PD, y el operar según la ec. 3.19 o la 3.20 son, a priori, elecciones que no deben influir en el resultado final del PD. Más aun, el modo de trabajo presentado en la ec. 3.19 y el de la 3.20 pueden resultar, en determinadas situaciones, complementarios. El primero de ellos parte de las matrices de diatenuación y retardo para llegar a los parámetros independientes, mientras que el segundo ajusta los parámetros independientes para dar lugar, finalmente, a las matrices correspondientes. Obviamente, el segundo de los métodos requiere una capacidad de cálculo y ajuste mucho más elevada, pero compatible con los procesadores actuales.

3.1.5. Descomposición Polar en Sistemas Despolarizantes

Los grados de libertad asociados al orden de actuación de los elementos presentes en la aplicación del PD a sistemas no despolarizantes se multiplican al trabajar con los despolarizantes. En estos sistemas introducimos una nueva matriz, la matriz de despolarización o M_{Δ} , que dará cuenta de los procesos de despolarización en el sistema. La permutación en el orden de los tres sistemas ópticos en los que descomponemos el sistema real (diatenuación, retardo y despolarización) da lugar a 6 posibles combinaciones matriciales. La siguiente descomposición:

$$M = M_{\Delta} M_R M_D \tag{3.21}$$

es particularmente interesante desde el punto de vista del análisis de las medidas experimentales. En primer lugar, porque separa claramente la componente despolarizante del sistema puro y, en segundo lugar, porque el orden relativo de ambas componentes hace que el grado de polarización de la luz completamente polarizada se conserve tras su paso por el sistema puro, y la componente despolarizante sea la única responsable de la pérdida del grado de polarización lineal (ver pg. 44 acerca de la disminución del grado de polarización lineal en la luz parcialmente despolarizada en sistemas puros). Esta descomposición es una generalización natural del PD a sistemas despolarizantes [98].

Dado que la capacidad de polarización de un sistema sólo puede describirse en base a la polarizancia del mismo y, por tanto, únicamente puede estar representada mediante las matrices que contengan un vector polarizancia, las 6 combinaciones matriciales posibles en la aplicación del PD a medios despolarizantes pueden ser clasificadas en dos familias. La familia de 3 combinaciones en las que la diatenuación preceda a la despolarización (ΔD) , y la familia de 3 combinaciones en las que la despolarización preceda a la diatenuación $(D\Delta)$. No obstante, únicamente la familia ΔD da lugar a matrices de Mueller con sentido físico en cualquiera de las tres permutaciones de elementos [130]. Actualmente se denomina a estas familias como descomposición directa (forward decomposition) en el caso ΔD , e inversa (reverse decomposition) en el caso $D\Delta$ [131, 125]. Sin embargo, la realización física de la descomposición inversa pasa por considerar como matriz de despolarización una matriz del tipo:

$$M_{\Delta,r} = \left(\begin{array}{cc} 1 & \mathbf{D}_{\Delta,r}^T \\ \mathbf{0} & m_{\Delta r} \end{array}\right)$$

y no la matriz de despolarización M_{Δ} considerada en otras referencias [98, 130]. A lo largo de la presente memoria, al igual que en distintos trabajos de actualidad [132, 35, 133, 134] se ha optado por una descomposición directa, como la expuesta en la ec. 3.21. No obstante, en la actualidad existen referencias [135] que han abordado ambos tipos de descomposición con similares resultados en términos de despolarización, diatenuación, rotación óptica y retardo, siempre y cuando las muestras a analizar presenten una matriz de despolarización cuya estructura sea lo suficientemente próxima a la de una matriz diagonal y la diatenuación presente valores bajos, es decir, muestras cuya despolarización sea debida casi únicamente a los coeficientes principales de despolarización (d_i) y cuya principal contribución sea la actividad óptica.

La aplicación del PD de acuerdo a la ec. 3.21 permite cualquiera de los dos tipos de actuación expuestos en el apartado 3.1.4, bien obteniendo los valores de diatenuación en primer lugar, o bien obteniendo las transmitancias y demás parámetros angulares de la descomposición por resolución del sistema de ecuaciones. Razonando del mismo modo que antes, si se pretenden obtener las matrices de los distintos elementos virtuales que compondrían el sistema (diatenuador, retardador y despolarizador), la forma más directa sería un cálculo del tipo expuesto en la ec. 3.19:

$$M' = M M_D^{-1} = M_\Delta M_R M_D M_D^{-1} = M_\Delta M_R = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{P}_\Delta & m' \end{pmatrix}$$
(3.22)

donde se ha determinado de forma directa el vector diatenuación \mathbf{D} , a partir de la primera fila de la matriz M, seguido de la matriz del diatenuador M_D y, por último, del vector polarizancia \mathbf{P}_{Δ} de la matriz de despolarización M_{Δ} , que queda definido de forma inequívoca por la primera columna de la matriz M'. Quedando reducido el problema a un problema de Descomposición Polar en el espacio de matrices 3×3 , siendo la matriz problema $m' = m_{\Delta} m_R$.

Si la submatriz m_{Δ} tiene como valores propios $d_1 \ge d_2 \ge d_3 \ge 0$, entonces la submatriz de despolarización 3×3 puede obtenerse de acuerdo con [98]:

$$m_{\Delta} = \pm \left(m'm'^{T} + (d_{1}d_{2} + d_{2}d_{3} + d_{3}d_{1})I_{3\times 3} \right)^{-1} \left((d_{1} + d_{2} + d_{3})m'm'^{T} + d_{1}d_{2}d_{3}I_{3\times 3} \right)$$
(3.23)

con signo + (-) si |m'| > 0 (< 0). Tras determinar la submatriz de despolarización, m_{Δ} , es inmediato comprobar que:

$$m_R = m_{\Delta}^{-1} m' = m_{\Delta}^{-1} m_{\Delta} m_R \tag{3.24}$$

Un cálculo equivalente puede ser llevado a cabo según el otro protocolo de actuación, denominado descomposición en valores singulares [91]:

$$m' = AD(d_1, d_2, d_3)B \tag{3.25}$$

con A y B matrices 3×3 ortogonales, y D matriz 3×3 diagonal. De modo que:

$$\begin{cases} m_{\Delta} = \pm ADA^T \\ m_R = \pm AB \end{cases}$$
(3.26)

donde se aplicará el mismo convenio de signos que en la ec. 3.23. Se puede apreciar claramente que m_{Δ} es una matriz simétrica semidefinida positiva, como ya se comentó con anterioridad.

No obstante, al igual que en la sección 3.1.4, la aplicación de ésta metodología de trabajo implica el desconocimiento de todos los parámetros acimutales y angulares hasta la obtención final de todas las matrices de la descomposición. Si, por otra parte, lo que se busca es identificar los parámetros característicos de transmitancia, despolarización y angulares, partiendo de unos intervalos de validez de los mismos, la solución de las 16 ecuaciones acopladas de la siguiente relación:

$$M = M_{\Delta}(d_i, a_i, z_i) M_R(\varphi, \delta, \rho) M_D(\alpha, \beta, p_1, p_2)$$
(3.27)

dará lugar a la obtención, mediante métodos de minimización de errores, de los 16 parámetros independientes con estricto sentido físico que actúan como incógnitas del sistema de ecuaciones. Este método, aplicado a medidas dinámicas de difusión, en las que se pretende determinar la dependencia con el ángulo de scattering (θ) de cada uno de estos parámetros, permite calcularlos sin necesidad de conocer previamente la matriz de la cual forma parte. Dado que se ha partido del PD generalizado (ec. 3.21), queda demostrado que cualquier matriz de Mueller que cumpla la ec. 3.27 es físicamente realizable y, por tanto, que todos los parámetros mantienen su significado, dentro de los márgenes de error de los ajustes necesarios para la obtención de los mismos y de la indeterminación propia de las magnitudes angulares. Esta indeterminación puede dar lugar a varias soluciones posibles, dependiendo del rango de definición de cada una de las magnitudes: Por ejemplo, $M_R(0, \delta, \pi/2) = M_R(0, -\delta, 0)$. Es, sin embargo, un punto a favor de este PD, pues para el análisis de las medidas de difusión se torna fundamental la continuidad máxima de los parámetros independientes con objeto de valorar su comportamiento en todo el plano de scattering. Haciendo uso de este tipo de transformaciones angulares se puede mantener, dentro del rango de trabajo de cada una de las variables angulares, una relativa continuidad de las mismas, que se torna en indeterminación únicamente en aquellos puntos donde aparecen singularidades, es decir, donde M_D resulta ser una matriz singular.

Esta forma de aplicación del PD será la utilizada a lo largo de ésta memoria. Resulta trivial comprobar que, sustituyendo los parámetros obtenidos por este procedimiento en las distintas matrices $(M_{\Delta}, M_R \text{ y } M_D)$ se obtienen los mismos resultados que aplicando la descomposición en valores singulares (aplicación de las ecs. 3.12, 3.13, 3.14 y 3.16). Es amplio el estudio que diversos autores vienen realizando recientemente acerca del PD y de la interpretación de distintos sistemas en base al mismo ([129, 133, 136, 132, 35]).

3.1.6. Otros Tipos de PD en Sistemas Despolarizantes

En la actualidad existe una tercera variante de aplicación del PD en sistemas despolarizantes mediante la descomposición de la matriz de Mueller del medio en un producto en serie de matrices. La formulación de este tipo de Descomposición simétrica es la siguiente [137]:

$$M = M_{D2}M_{R2}M_{\Delta}M_{R1}M_{D1} \tag{3.28}$$

donde únicamente el despolarizador sería responsable de la transmitancia total del sistema (m_{00}) , manteniendo así el total de 16 parámetros independientes del PD por medio del uso de un despolarizador parcial (puro o diagonal) del tipo:

$$M_{\Delta} = \begin{pmatrix} d_0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & d_1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & d_2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & d_3 \end{pmatrix}$$
(3.29)

Este método de descomposición facilita el cálculo de las matrices diatenuación. Haciendo uso de la primera fila de la matriz de Mueller del sistema se obtiene la primera de las matrices de diatenuación:

$$MM_{D1}^{-1} = M_{D2}M_{R2}M_{\Delta}M_{R1} \tag{3.30}$$

mientras que utilizando la primera columna de la matriz resultante se obtendría la segunda de las matrices de diatenuación, de forma que:

$$M' = M_{D2}^{-1} M M_{D1}^{-1} = M_{R2} M_{\Delta} M_{R1}$$
(3.31)

a partir de la cual, por medio de una descomposición en valores singulares (ec. 3.25), se obtendrían todas las variables del sistema.

Las diferencias de computación entre este procedimiento, el directo y el inverso no son, en cualquier caso, sustanciales. Además, como en todo momento se está trabajando con matrices que poseen un estricto sentido físico, la interpretación de las mismas no carece de significado, en ninguno de los casos. Dependiendo de la aplicación que se pretende dar al PD se puede elegir cualquiera de los tipos de descomposición. En particular, tal y como se expone en la referencia [137], la aplicación del PD simétrico permite averiguar, no sólo los valores principales de despolarización del sistema, sino cual es la localización del proceso de despolarización en el sistema analizado, i.e. la secuencia del sistema óptico equivalente. Para ello, si los elementos M_{D2} y M_{R2} (ec. 3.28) de la descomposición simétrica tienen valores cercanos a la identidad, significaría que la despolarización es el último proceso que afecta al sistema. Por otro lado, si tanto M_{D2} y M_{R2} como M_{D1} y M_{R1} varían considerablemente con respecto a la matriz identidad, la despolarización ocurre en el proceso central. Finalmente, si M_{D1} y M_{R1} son cercanos a la identidad, entonces la despolarización es el proceso inicial que afecta al sistema.

Descomposición Polar en Paralelo

Mientras que en las descomposiciones en serie analizadas hasta el momento la contribución específica de la despolarización está incluída en la matriz del mismo nombre, existe una rama de PD que comienza a adquirir protagonismo [138, 139], denominada PD en paralelo. A partir de los estudios de Cloude, y en base a la definición de despolarización como superposición incoherente de estados, se puede ver que una suma incoherente de matrices de sistemas puros puede dar lugar a un sistema despolarizante. Una vez situados en la perspectiva del PD en paralelo, es necesario hacer hincapié en que cualquier PD en paralelo es físicamente realizable si y sólo si se puede expresar como una combinación lineal convexa [91]. En todas las descomposiciones en paralelo, el número de componentes puras de la combinación lineal es igual al rango de la matriz de Coherencia T.

La primera forma de verlo sería utilizando la suma de los estados propios pesada con los valores propios, es decir, una suma de hasta cuatro términos (dependiendo del rango de la matriz T) generados a partir de los vectores propios de T pesados con sus valores propios ($0 \le \lambda_3 \le \lambda_2 \le \lambda_1 \le \lambda_0$) [117]:

$$T = \sum_{i=0}^{3} \frac{\lambda_i}{Tr(T)} T^{(i)}, \text{ donde } T^{(i)} = Tr(T)(\mathbf{u}_i \times \mathbf{u}_i^+)$$
(3.32)

Este tipo de PD en paralelo es la llamado *descomposición espectral*. Desde el punto de vista puramente matemático, cada valor propio tiene una interpretación en términos de probabilidad, lo cual permite analizar magnitudes como la entropía y la pureza del sistema a partir de dichos valores [91].

Un segundo criterio sería la denominada descomposición trivial, resumida en la ecuación:

$$T = \frac{\lambda_0 - \lambda_1}{Tr(T)} A + 2\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{Tr(T)} B^{(1)} + 3\frac{\lambda_2 - \lambda_3}{Tr(T)} B^{(2)} + 4\frac{\lambda_4}{Tr(T)} B^{(4)}$$
(3.33)

donde se han definido las matrices involucradas, a partir de las matriz U cuyas columnas son los autovectores de T y de la matriz diagonal D cuyos valores de la diagonal se muestran entre paréntesis, como:

$$A = Tr(T)(UD(1,0,0,0)U^{+})$$

$$B^{(1)} = \frac{1}{2}Tr(T)(UD(1,1,0,0)U^{+})$$

$$B^{(2)} = \frac{1}{3}Tr(T)(UD(1,1,1,0)U^{+})$$

$$B^{(3)} = \frac{1}{4}Tr(T)(UD(1,1,1,1)U^{+})$$
(3.34)

La descomposición trivial es especialmente útil cuando se pretende discriminar entre un estado puro de polarización y uno completamente aleatorio, en cuyo caso únicamente serían necesarios los dos primeros términos de la ec. 3.33.

$$T = \sum_{i=0}^{3} \frac{l_i}{Tr(T)} A^{(i)}, \text{ donde} \begin{cases} \sum_{i=0}^{3} \frac{l_i}{Tr(T)} = 1, \\ A^{(i)} = A^{(i)+}, \\ rango(A^{(i)}) = 1, y \\ Tr(A^{(i)}) = Tr(T) \end{cases}$$
(3.35)

Para finalizar este breve análisis de las descomposiciones en paralelo, es necesario comentar brevemente la *descomposición arbitraria* que abarca diversos trabajos, desde sus primeras aplicaciones [140, 23] hasta la actualidad [141, 138]. La expresión matemática de la descomposición arbitraria se corresponde con la ec. 3.35. Otra formulación equivalente es la siguiente:

$$T = \sum_{i=0}^{3} \frac{l_i}{Tr(T)} [Tr(T)(\mathbf{v}_i \times \mathbf{v}_i^+)]$$
(3.36)

donde $|\mathbf{v}_i| = 1$ son vectores linealmente independientes que constituyen una base generalizada ortogonal [91]. Como se puede ver, la descomposición espectral es solamente un caso particular de la descomposición arbitraria.

El uso de un tipo u otro de descomposición, en la actualidad, está únicamente determinado por el tipo de aplicación al que vaya dirigido. No obstante, la información polarimétrica tangible y elaborada que aporta la descomposición en serie para sistemas totalmente desconocidos hace que sea, a menudo, la forma elegida para caracterizar las propiedades de dichos sistemas.

3.2. Aplicabilidad y Resultados Numéricos

Pese a que el presente capítulo es eminentemente teórico, considero necesario incluir un test de aplicación del PD, como paso previo a su uso en sistemas experimentales y como forma de familiarización con la metodología de trabajo. Para ello se ha aplicado con éxito el PD en diversas simulaciones de geometrías sencillas, como veremos a continuación. Algunos de los resultados de aplicación de este procedimiento están a la espera de ser publicados, y otros ya han visto la luz a lo largo de últimos dos años [142, 143, 144].

3.2.1. Esfera Aislada

Un sistema muy sencillo es el formado por una esfera aislada. Su radio se ha hecho variar entre $r = 0.01\lambda$ y $r = 0.60\lambda$, para tener un rango suficiente de resultados que abarquen la escala submicrométrica y nanométrica. La esfera se ha iluminado por una onda plana de $\lambda = 633nm$ (fig. 3.1(a)). Para cada tamaño se han supuesto dos materiales: Dieléctrico (SiO_2 con índice de refracción, n = 1.5 para una longitud de onda del haz incidente $\lambda = 633nm$), y metálico (Ag, n = 0.135 + 3.988i para $\lambda = 633nm$). En la fig. 3.1(b) se muestra una simulación, realizada en el entorno COMSOL, para una esfera de Plata de tamaño $r = 0.1\lambda$.

Las matrices de scattering obtenidas por medio del DDA (sección 2.2.1, pg. 22) fueron procesadas por un algoritmo para el cálculo de los parámetros del PD. Una vez calculado el grado de pureza de las matrices, P(M) en la ec. 3.8, se concluyó que todas ellas eran puras. Este resultado era de esperar, ya que se trata de un sistema que no incluye ningún mecanismo de despolarización. Además, y debido a las simetrías de un sistema difusor tan sencillo, el PD se simplifica notablemente. Así, las distintas matrices de Mueller pueden ser descompuestas según la ec. 3.20. Según esto, la forma analítica de la matriz de retardo, aplicando la ecuacion 3.2, es:





(b) Simulación del módulo del campo.



$$M_{R}(\varphi, \delta, \psi) = \begin{cases} m_{R00} = 1; \\ m_{R0j} = m_{Rj0} = 0; \ j \in \{1,3\}; \\ m_{R11} = \cos(2\psi \cdot (\cos^2(2\varphi) + \cos(\delta) \cdot \sin^2(2\varphi)) + \\ + \frac{1}{2} \cdot \sin(2\psi \cdot \sin(4\varphi) \cdot (\cos(\delta) - 1); \\ m_{R12} = \sin(2\psi \cdot (\cos^2(2\varphi) + \cos(\delta) \cdot \sin^2(2\varphi)) - \\ - \frac{1}{2} \cdot \cos(2\psi \cdot \sin(4\varphi) \cdot (\cos(\delta) - 1); \\ m_{R13} = -\sin(2\psi) \cdot (\sin^2(2\varphi) + \cos(\delta) \cdot \cos^2(2\varphi)) - \\ - \frac{1}{2} \cdot \cos(2\psi \cdot \sin(4\varphi) \cdot (\cos(\delta) - 1); \\ m_{R22} = \cos(2\psi \cdot (\sin^2(2\varphi) + \cos(\delta) \cdot \cos^2(2\varphi)) - \\ - \frac{1}{2} \cdot \sin(2\psi \cdot \sin(4\varphi) \cdot (\cos(\delta) - 1); \\ m_{R23} = -\cos(2\varphi) \cdot \sin(\delta); \\ m_{R31} = \cos(2\psi \cdot \sin(2\varphi) \cdot \sin(\delta) + \\ + \sin(2\psi \cdot \cos(2\varphi) \cdot \sin(\delta); \\ m_{R32} = \sin(2\psi \cdot \sin(2\varphi) \cdot \sin(\delta) - \\ - \cos(2\psi \cdot \cos(2\varphi) \cdot \sin(\delta); \\ m_{R33} = \cos(\delta); \end{cases}$$
(3.37)

mientras que, debido a la simplicidad del sistema, la matriz de diatenuación queda reducida a:

$$M_{D}(\alpha, t) = \begin{cases} m_{D00} = 1; \\ m_{D3j} = m_{Dj3} = 0, \ j \in \{0,3\}; \\ m_{D01} = m_{D10} = 2 \cdot \cos(2\alpha) \cdot \left(t - \frac{1}{2}\right); \\ m_{D02} = m_{D20} = 2 \cdot \sin(2\alpha) \cdot \left(t - \frac{1}{2}\right); \\ m_{D11} = \cos^{2}(2\alpha) + 2 \cdot \sin^{2}(2\alpha) \cdot \sqrt{t \cdot (1 - t)}; \\ m_{D12} = m_{D21} = -2 \cdot \cos(2\alpha) \cdot \sin(2\alpha) \cdot \left(\sqrt{t \cdot (1 - t)} - \frac{1}{2}\right); \\ m_{D22} = \sin^{2}(2\alpha) + 2 \cdot \cos^{2}(2\alpha) \cdot \sqrt{t \cdot (1 - t)}; \\ m_{D33} = 2 \cdot \sqrt{t \cdot (1 - t)}; \end{cases}$$
(3.38)

pues $\beta = 0$, y $t = t_1 = 1 - t_2$. Donde α es el ángulo acimutal entre el plano de scattering y el eje de referencia del diatenuador y $t_i = p_i^2$ es la transmitancia del estado propio *i*. En este caso t se corresponde con la transmitancia que el diatenuador presenta ante una onda P.

Debido a las propiedades de simetría del sistema y, tomando el origen de acimuts en la dirección contenida en el plano de difusión, tanto α como φ son nulos. Además, $\psi = 0$ pues el eje rápido del
retardador es lineal, tal y como se desprende del PD. Por todo esto, el sistema se puede descomponer en un sistema equivalente compuesto por un diatenuador lineal alineado con el plano de scattering y con el eje rápido de un retardador lineal.

La matriz de Mueller de una partícula esférica viene descrita por cuatro parámetros $(m_{00}, m_{01}, m_{22} \text{ and } m_{23})$ [5]. Sin embargo, sólo tres son independientes. Algunas magnitudes como el grado de polarización circular 2.92 y, en sistemas múltiples, la despolarización circular, han sido introducidos para especificar las conexiones existentes entre los distintos parámetros [145, 114, 146]. En este caso, si se examinan con detalle las propiedades polarimétricas del sistema y se aplica el PD, se puede evaluar la evolución del mismo considerando simplemente tres parámetros independientes: La transmitancia total media para luz incidente despolarizada (m_{00}) , la transmitancia de uno de los estados propios del diatenuador (t) y el desfase introducido por el retardador (δ) . Veremos cómo t está ligado a P_L y a la polarizancia de este sistema.

En la fig. 3.2 se muestra la evolución angular de los parámetros polarimétricos para la esfera aislada, tomando ocho valores diferentes de radio. Comenzamos por el caso de la esfera metálica: Las figs. 3.2(a) y 3.2(e) se corresponden con el grado de polarización lineal ($P_L = -m_{10}/m_{00}$) en función del ángulo de scattering (θ) en el hemisferio de retrodifusión (*backscattering*, [90⁰-180⁰]). Las figs. 3.2(b) y 3.2(f), por su parte, representan la transmitancia del diatenuador (t), obtenida mediante el PD. Como se puede observar, las curvas presentes en (a) y (e) pueden ser obtenidas a partir de sus análogas en (b) y (f), mediante la ecuación $P_L = 1 - 2t$. Pese a que éste no es un resultado general, pues sólo se verifica en sistemas puros, lógicamente también se cumple en este sistema. Cuando la luz emergente de la esfera está linealmente polarizada ($|P_L| = 1$), la transmitancia a través de uno de los ejes del diatenuador es máxima, es decir, t = 0 o bien t = 1. Por contra, cuando P_L es cero, la transmitancia es la misma para ambos ejes (t = 0,5), es decir, la luz difundida está polarizada circularmente (dado que el sistema es puro y no introduce efectos incoherentes).

Las figs. 3.2(c) y 3.2(g) muestran la polarizancia. Debido a que el sistema es puro y presenta simetría esférica, esas curvas también representan la diatenuación, resultante de intercambiar la dirección de incidencia de la luz y la de difusión. De nuevo, se puede relacionar la polarizancia con la transmitancia, ya que $|\mathbf{P}| = |P_L|$. Como era de esperar, las figuras (c) y (g) tienden a cero cuando el diatenuador no presenta preferencia ante ninguno de los ejes (t = 0.5). Tal es el caso de $\theta = 180^{\circ}$, donde ninguna polarización lineal puede distinguirse por razones de simetría.

Finalmente, en las figs. 3.2(d) y 3.2(h) se representa el retardo introducido por el retardador lineal equivalente. Tanto t como δ permiten, en este caso, observar la transición entre la región nanoscópica y la submicroscópica. El desfase que presenta la matriz de retardo incrementa su oscilación con el tamaño de partícula, de la forma que se esperaría para una partícula esférica aislada según la teoría de Mie (sección 2.2.1). En la actualidad, las funciones de scattering son denominadas, con frecuencia, funciones de fase [147], nombre que a la vista de los resultados adquiere su pleno significado.



Figura 3.2: Esfera de Ag aislada (n = 0.135 + 3.988i): (a)(e) P_L , (b)(f) t, (c)(g) Polarizancia y (d)(h) Δ vs. θ (Izquierda: Radios desde $r = 0.01\lambda$ hasta $r = 0.20\lambda$ / Derecha: Radios desde $r = 0.25\lambda$ a $r = 0.60\lambda$).

En la fig. 3.3 se han representado el mismo conjunto de parámetros para una esfera dieléctrica. En el caso del desfase δ , generalmente definido en el intervalo $[0^0, 360^0]$, se ha habilitado que el mismo pueda adquirir valores superiores, para permitir la continuidad de las curvas y mejorar la visualización. De nuevo, se puede observar que las relaciones $P_L = 1 - 2t$ y $|\mathbf{P}| = |P_L|$ también se verifican para el caso de una esfera dieléctrica. Para la colección de tamaños grandes, en general, la esfera dieléctrica muestra mayor desfase que la metálica. Este hecho podría relacionarse con la fuerte penetración del campo en la partícula dieléctrica. Por otro lado, al igual que en el caso metálico, las oscilaciones aumentan con el tamaño de la partícula.

Otro comportamiento interesante de los gráficos de la esfera dieléctrica aparece en determinados ángulos de scattering, que no coinciden con los ángulos específicos de difusión directa, retrodifusión o difusión a 90^0 , para los cuales aparecen valores especiales de transmitancia (0; 0,5; 1). Una vez predichas, ya sea por su presencia o ausencia, estas propiedades polarimétricas particulares se comportan como elementos identificativos del sistema.

Llegado a este punto, puedo afirmar que la aplicación del PD a un sistema de scattering simple, como es una esfera dieléctrica o metálica aislada de dimensión inferior a la longitud de onda del haz incidente, se ha realizado con éxito. Obteniendo, en virtud de las magnitudes derivadas del PD, las propiedades de difusión y polarimétricas del sistema. Los resultados, acordes a la simetría del sistema, reflejan la evolución angular de unos pocos parámetros independientes, deshaciendo por completo las ligaduras a las que están sujetos los elementos de la matriz de Mueller del sistema. El parámetro tmuestra la transmitancia de uno de los ejes del polarizador lineal equivalente, es decir, la transmitancia de uno de los estados propios de la matriz de diatenuación, e informa a cerca del grado de polarización lineal (P_L) de la luz que emerge y de la polarizancia |**P**| del sistema. Además, la fase introducida por el sistema en las componentes de la luz incidente se muestra, una vez se ha aplicado el PD, como el desfase (δ) del retardador equivalente.

Lógicamente el propósito de este análisis no es arrojar nuevos resultados acerca del problema de scattering por una partícula esférica pequeña. Se pretende mostrar cómo el PD produce resultados listos para ser interpretados físicamente, algo que se hará particularmente importante cuando se trate de sistemas mucho más complejos y situaciones experimentales. Es decir, los 7 parámetros resultantes de la aplicación del PD en sistemas puros son fáciles de manejar, y representan magnitudes de elementos virtuales simples que ayudan a mejorar la compresión de los procesos involucrados en sistemas complejos no despolarizantes.



Figura 3.3: Esfera de SiO_2 aislada (n = 1,5): (a)(e) P_L , (b)(f) t, (c)(g) *Polarizancia* y (d)(h) Δ vs. θ (Izquierda: Radios desde $r = 0,01\lambda$ hasta $r = 0,20\lambda$ / Derecha: Radios desde $r = 0,25\lambda$ a $r = 0,60\lambda$).

3.2.2. Par de Esferas Metálicas

El siguiente sistema de difusión que hemos sometido a análisis mediante el PD consiste en un par de esferas metálicas de Plata $(n = 0,135 + 3,988i \text{ para } \lambda = 633nm)$ de radio $r = 0,1\lambda$ y cuya distancia entre superficies está comprendida entre $d = 0,1\lambda$ y $d = 0,8\lambda$. Para realizar los cálculos de la matriz de Mueller por medio del DDA, se han considerado tres geometrías diferentes (figuras 3.4(a), (b) y (c)), sobre las que se hace incidir una onda plana monocromática de $\lambda = 633nm$. Al igual que en la sección 3.2.1, las matrices de difusión han sido analizadas por medio del PD (ec. 3.20), tras haber comprobado que el sistema era puro con un alto grado de aproximación (ec. 3.8). También en este caso los sistemas analizados pueden ser representados únicamente mediante tres parámetros independientes: La transmitancia total media para luz incidente despolarizada (m_{00}) , la transmitancia de uno de los estados propios del diatenuador (t) y el desfase introducido por el retardador (δ) . En la fig. 3.2.2 se muestran algunas simulaciones en la región de campo cercano para distintas posiciones relativas del par de esferas realizadas en el entorno de simulación COMSOL.



Figura 3.4: Geometrías experimentales de la difusión por un par de esferas: (a) Geometría X, (b) Geometría Y, (c) Geometría Z y (d) Geometría X (modelo de interferencia).

Una vez eliminada la posibilidad de que se produzcan efectos incoherentes (sistemas puros), se ha seguido el análisis de tipo interferencial propuesto en la referencia [85], con objeto de predecir la posición de los distintos mínimos interferenciales de los sistemas. El modelo consta de dos difusores puntuales independientes (fig. 3.4(d)), de modo que se pueden evaluar las posiciones angulares para las que t presenta mínimos. En estos puntos aparecen fuertes desfases y cambios en el grado de polarización lineal (de nuevo $P_L = 1 - 2t$). Las posiciones interferenciales se presentan en la ec. 3.39, y son consecuencia de los retardos en la fase introducidos por las diferencias de camino óptico (Λ y Ω).

$$\begin{cases} \Omega - \Delta = (2n-1)\pi = \left(\frac{2\pi d}{\lambda}\right)(1 - \cos\theta) \text{ para la Geometría X} \\ \Delta = (2n-1)\pi = \left(\frac{2\pi d}{\lambda}\right)(\sin\theta) \text{ para la Geometría Z} \end{cases}$$
(3.39)

donde θ es el ángulo de scattering, n es el orden de los mínimos y d es la distancia entre los difusores.

Como muestra la fig. 3.5, pequeñas separaciones entre las esferas suavizan la visibilidad de los mínimos y cambian la posición de los mismos, tanto en la Geometría X como en la Geometría Z, debido a la fuerte interacción [85]. No obstante, cuando aumenta la separación entre esferas, la interacción disminuye, mejorando la predicción en la posición de los mínimos por medio del modelo interferencial. Por otro lado, como era de esperar, la Geometría Y no introduce ninguna interferencia en la luz difundida en el plano de scattering, mostrando únicamente una pequeña desviación con respecto a la difusión por una partícula aislada del mismo tamaño, que se traduce en un ligero aumento de la transmitancia total.

Para finalizar, sólo queda hacer hincapié en la capacidad del PD para describir plenamente el comportamiento óptico del sistema. La posibilidad de aplicarlo a otras geometrías, sin importar su complejidad, hace que los 16 elementos de la matriz de Mueller puedan ser reducidos en un número igual o inferior, dependiendo de las ligaduras, de parámetros independientes.



Figura 3.5: Evolución de las magnitudes polarimétricas en la difusión por un par de esferas: (a) P_L y t frente a θ , (b) m_{11} y δ frente a θ



Figura 3.6: Simulaciones de la difusión por un par de partículas en campo cercano.

3.2.3. Superposición Incoherente de Estados

Dado que en los dos apartados anteriores el PD es aplicado a sistemas puros, para tener un muestreo completo de posibles situaciones experimentales sobre las que aplicarlo es necesario incluir sistemas despolarizantes. El DDA trabaja con vectores campo eléctrico y matrices de Jones, con lo cual no nos permite obtener matrices de Mueller despolarizantes. Sin embargo, la suma incoherente de distintos estados de polarización emergentes de matrices de Mueller puras, da lugar a vectores de Stokes que pueden tener un grado de polarización distinto de 1. Como se vió en la sección 3.1.6:

$$M = \sum_{i=0}^{n} p_i M^{(i)} \tag{3.40}$$

donde M representa a una matriz de Mueller cuyo grado de pureza es $P(M) \leq 1$, $M^{(i)}$ son distintas matrices de Mueller con $P(M^{(i)}) = 1$ y p_i serían los distintos pesos que se le aplicarían a cada una de las matrices puras. Si al vector de Stokes del haz incidente, $\mathbf{s_{inc}}$, lo hacemos pasar por el medio teórico de matriz de Mueller M, el grado de polarización del vector de Stokes del haz emergente, $\mathbf{s_{out}}$, será $P \leq 1$:

$$\mathbf{s_{out}} = M\mathbf{s_{inc}} = (\sum_{i=0}^{n} p_i M^{(i)}) \mathbf{s_{inc}}$$
(3.41)

Siguiendo este razonamiento, se ha realizado un experimento teórico sencillo para obtener matrices de Mueller despolarizantes. El experimento consiste en simular que en un intervalo de tiempo dado, nuestro polarímetro realiza una medida sobre la luz difundida por una suspensión muy diluída de dímeros (como los de la sección 3.2.2). La medida se realiza de forma que éstos dímeros no puedan interaccionar entre ellos (no "se ven"). Pero, bien por el efecto de la ventana de detección (incoherencia espacial) o bien por la cinética de los dímeros en suspensión (incoherencia temporal), en el intervalo de tiempo que dura la medida el polarímetro detecta la luz difundida por las tres configuraciones geométricas de los dímeros respecto al plano de incidencia: La Geometría X, la Y y la Z. Además, se supone que esta detección se realiza en la misma proporción para las tres configuraciones. El vector de Stokes de la luz difundida será el siguiente (en función del ángulo de Scattering θ):

$$\mathbf{s_{out}}(\theta) = M(\theta)\mathbf{s_{inc}} = \frac{1}{3}M^{(X)}(\theta)\mathbf{s_{inc}} + \frac{1}{3}M^{(Y)}(\theta)\mathbf{s_{inc}} + \frac{1}{3}M^{(Z)}(\theta)\mathbf{s_{inc}}$$
(3.42)

de esta forma, la matriz de Scattering del sistema teórico será:

$$M(\theta) = \frac{1}{3}M^{(X)}(\theta) + \frac{1}{3}M^{(Y)}(\theta) + \frac{1}{3}M^{(Z)}(\theta)$$
(3.43)



Figura 3.7: Pureza de la matriz de Mueller y Capacidad de Despolarización resultante del PD, en función del ángulo de scattering (θ) , en sistemas de dos partículas (Ag) por suma incoherente de estados.

Podríamos hacer muchos más experimentos de este tipo, cambiando los pesos de cada configuración, añadiendo o suprimiendo geometrías... Incluso se podría estudiar el nivel de despolarización en función de la aleatoriedad de las contribuciones. No obstante, para conseguir matrices de Mueller despolarizantes, con este experimento será suficiente. Si descomponemos la matriz de Mueller resultante de acuerdo a la ec. 3.21, obtendremos los parámetros resultantes del PD:

$$M(\theta) = M_{\Delta}(d_i(\theta), a_i(\theta), z_i(\theta)) M_R(\varphi(\theta), \delta(\theta), \rho(\theta)) M_D(\alpha(\theta), \beta(\theta), t_1(\theta), t_2(\theta))$$
(3.44)

En general, una vez que la matriz ya ha sido normalizada al valor $m_{00}(\theta)$, se cumple $t_1(\theta) = 1 - t_2(\theta)$. Además, en este caso particular, aplicando el PD se obtiene

$$a_i(\theta) = z_i(\theta) = \varphi(\theta) = \rho(\theta) = \alpha(\theta) = \beta(\theta) = 0$$

En la fig. 3.7 se expone la evolución de los valores de la pureza y la capacidad de despolarización (Δ , ec. 3.16) con el ángulo de difusión para las matrices obtenidas al realizar el experimento teórico anterior. Los dímeros están formados por pares de esferas metálicas de igual tamaño (Ag, n = 0,135 + 3,988i para $\lambda = 633nm$). Los tamaños de las esferas metálicas utilizados son $r = 0,1\lambda$, $r = 0,2\lambda$ y $r = 0,4\lambda$. La separación entre paredes de las esferas que componen el dímero, igual para todos los tamaños, es $d = 0,1\lambda$. Se puede apreciar la aparición de despolarización al realizar la suma incoherente de estados en los tres ejemplos, de forma particular para cada tamaño.



Figura 3.8: Parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ), en un sistema de dos partículas (Ag, $r = 0.1\lambda$; $d = 0.1\lambda$) por suma incoherente de estados.



Figura 3.9: Parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) , en un sistema de dos partículas (Ag, $r = 0.2\lambda$; $d = 0.1\lambda$) por suma incoherente de estados.

A continuación se exponen, en las figs. 3.8, 3.9 y 3.10 los resultados relativos a la evolución de los parámetros de las matrices de diatenuación (figs. 3.8(a), 3.9(a) y 3.10(a) relativas a las transmitancias del diatenuador), retardo (figs. 3.8(b), 3.9(b) y 3.10(b), en las que el único parámetro que varía es el desfase δ) y despolarización (figs. 3.8(c), 3.9(c) y 3.10(c), en las que se representan los valores principales de despolarización). Es un hecho curioso, sobre el que se volverá a hablar en el capítulo de resultados, que el valor d_1 no presente variación alguna, mientras que d_2 y d_3 sean los que contribuyan principalmente a la despolarización. Esto se traduce en que la despolarización presente en este experimento teórico, debida en la superposición incoherente de estados para dímeros metálicos de tamaño inferior a la longitud de onda, λ , afecta selectivamente a la luz incidente. La componente polarizada del



Figura 3.10: Parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ), en un sistema de dos partículas (Ag, $r = 0.4\lambda$; $d = 0.1\lambda$) por suma incoherente de estados.

haz incidente sólo se vería afectada por la despolarización si presenta polarización elíptica o lineal con azimut distinto de 0^0 ó 90^0 (fuera de los ejes propios del diatenuador). Si, por el contrario, se incidiera sobre este medio con Onda P u Onda S, el hecho de que retardador y diatenuador presenten valores acimutales nulos hacen que el haz incidente no varíe su estado de polarización en su paso por la parte pura en la que se ha descompuesto el sistema y, por tanto, no se verá afectado por la despolarización (recordemos que el parámetro d_1 no contribuye a la despolarización en este experimento). Es decir, la incidencia con un haz cuyo estado de polarización sea P o S, sobre este sistema con esta longitud de onda, asegura que la luz difundida conserva las propiedades polarimétricas del haz incidente (polarización P o S) variando únicamente la intensidad detectada de acuerdo a la transmitancia total del sistema ($m_{00} \cdot t_2$ ó $m_{00} \cdot t_1$, respectivamente).

Capítulo 4

Dispositivo Experimental

Gran parte del tiempo empleado en la realización de esta tesis doctoral ha estado dedicado al montaje y puesta a punto de los dispositivos polarimétricos. Lo que empezó como un simple scatterómetro (del cual no se conocía la linealidad del detector, la curva de calentamiento del láser o, incluso, el factor de extinción de los polarímetros) se ha convertido en un polarímetro cuya precisión está bien caracterizada, tal como se expondrá a lo largo del presente capítulo.

Uno por uno se han estudiado y probado todos los componentes del montaje experimental, su posición en el mismo y su forma de trabajo. Se trata de reducir al máximo los errores y ganar precisión, repetitividad y reproducibilidad en la medida. El montaje ha sido desarrollado de forma que las medidas pudieran ser realizadas bajo el control de un ordenador. Dicho ordenador fue programado desde el comienzo para realizar las medidas con carácter semi-automático en el entorno de pseudo-programación de laboratorio *VEE*.

Una vez controlados todos los aspectos del dispositivo de laboratorio, se realizaron distintos test sobre sistemas polarimétricos sencillos: Medidas directas en vacío, medidas directas a través de medios ópticos conocidos, medidas de reflexión en interfases dieléctricas o metálicas, medidas de reflexión total en prismas o medidas de la difusión generada por una superficie Lambertiana. Tales pruebas confirmaron la fiabilidad y el rango de trabajo no sólo de los dispositivos, sino también de los algoritmos de tratamiento de datos.

El otro gran escollo experimental, una vez librado el problema de la puesta en marcha del dispositivo polarimétrico, es la fabricación de muestras fiables en el rango micrométrico, que permitan extraer información, por medio del método de Descomposición Polar (PD), de su composición, forma, tamaño o propiedades ópticas, llegado el caso, haciendo viable el estudio del problema inverso mediante el uso de los parámetros derivados del PD. Los procedimientos de fabricación, la manipulación y las características físicas que presentan las muestras, serán objeto de estudio en este capítulo.

4.1. Análisis de Componentes

Es necesario indicar que el polarímetro diseñado para la realización de medidas experimentales tiene, como ya se adelantó en la sección 2.3.3, una doble modalidad de funcionamiento, como polarímetro de Compensador Dual Rotatorio (DRCP) o como polarímetro de Stokes (SP), sin necesidad de añadir o quitar ninguno de los componentes. Según este planteamiento, el montaje polarimétrico se puede resumir en los componentes de la fig. 4.1, que se detallan a continuación.

4.1.1. Láser y Polarizadores

En la fig. 4.1 aparece un generador de estados de polarización (PSG) compuesto por un polarizador y un retardador, y un analizador de estados de polarización (PSA) compuesto por un retardador y un polarizador-analizador. Ambos polarizadores son polarizadores dicroicos de la casa *Melles Griot*, que presentan una Densidad Óptica (OD) superior a 4 cuando se cruzan sus ejes de polarización en un rango de longitudes de onda entre 380 y 780 nm. Se encuentran colocados en sendas monturas rotatorias que permiten giros de 360° con una precisión de 0.5° . Se ha utilizado, por su potencia y

versatilidad, un láser He:Ne de la casa *Coherent*, que emite con una longitud de onda de 632,8 nm y una potencia de, aproximadamente, 30 mW. La luz emergente del láser es linealmente polarizada. Para regular manualmente la potencia del láser, dado que su emisión es linealmente polarizada y que existe un polarizador de entrada en el PSG, ha sido utilizada una lámina de cuarto de onda $(\lambda/4)$ de orden cero para una longitud de onda de 632,8 nm. El montaje fue alineado de forma que láser y polarizador de entrada (P) presentan estados de polarización cruzados, es decir, se encuentran en situación de extinción. Introduciendo la lámina de cuarto de onda se puede controlar la intensidad transmitida a la entrada del PSG por medio de la elipticidad del estado de polarización generado en la luz linealmente polarizada que atraviesa la misma, y que depende de la orientación relativa que presentan el eje de polarización de la luz incidente y los ejes propios de la lámina retardadora. Se ha comprobado, mediante calibrados, posicionando la lámina de cuarto de onda en distintas orientaciones, que esta forma de controlar la potencia no influye en las medidas, siempre y cuando se trabaje dentro del rango útil del detector (D), es decir, que no se sature el detector o que la relación señal-ruido permita una medida fiable.



Figura 4.1: Dispositivo Experimental.

Es conocido que los láseres necesitan un tiempo de calentamiento para optimizar su emisión, que es característico de cada láser, tras el cual la intensidad emitida es bastante estable. Para conocer la forma de emisión, y las propiedades del láser He:Ne con el que se iba a trabajar, se realizaron varias medidas con objeto de controlar, entre otras cosas, la anchura, dispersión, fluctuaciones y curva de calentamiento del mismo. En la fig. 4.2 se muestran las características de emisión en intensidad del láser He:Ne utilizado. En la fig. 4.2(a) se puede apreciar claramente como, una vez transcurridos 30 minutos tras el encendido del láser, la intensidad de emisión es aproximadamente constante. Por otro lado, la fig. 4.2(b) revela que las fluctuaciones en la intensidad de la emisión del láser para tres ciclos de 10 minutos son de ± 1 % cuando el láser ya se ha calentado. En ambas figuras las unidades del eje de ordenadas son arbitrarias, ya que el detector utilizado para la medida (Foto-receptor de Silicio de la marca *NewFocus*) se ha situado tras una OD 3 (no calibrada) para evitar que fuera dañado por el láser.



Figura 4.2: Características de emisión en intensidad del láser He:Ne.

Para aumentar las posibilidades de trabajo del dispositivo experimental, en el mismo montaje y usando un periscopio, se añadió un nuevo láser que puede ser utilizado desplazando el original de He:Ne y alineando el sistema. Dicho láser, de la factoría *Melles Griot*, es un láser Ar:Kr multibanda sintonizable, con refrigeración por aire, que emite un haz linealmente polarizado. Las potencias máximas de emisión para las distintas bandas del espectro se reflejan en la tabla 4.1. Sin embargo, la intensidad de emisión puede ser controlada manualmente, y la estabilidad de la misma está garantizada por medio de un mecanismo de realimentación (*Batch*) que presenta la tarjeta controladora del láser. No obstante, mientras no se indique lo contrario, los comentarios que se realicen serán referidos al láser He:Ne original.

λ (nm)	476	483	488	496	514	520	568	647	676
Potencia Máxima (mW)	4	10	20	4	10	20	20	20	6

Tabla 4.1: Bandas de emisión del láser Ar:Kr.

4.1.2. Elección de Compensadores

La elección de láminas $\lambda/4$ para su uso como compensadores fue realizada conociendo los procedimientos para minimizar errores usados en las referencias [148] y [149]. En dichas referencias se afirma que el retardo óptimo en los compensadores para conseguir minimizar los errores debe ser de 127⁰. No obstante, dado que los componentes del montaje no son electro-ópticos, se estimó oportuno el uso de láminas retardadoras $\lambda/4$ de orden cero, cuya precisión en el retardo para esta longitud de onda estaría garantizada, y su dependencia con la longitud de onda no respondería a las complicadas leyes de los desfasadores de orden múltiple. A pesar de que un retardo de 90⁰ aumenta en dos órdenes de magnitud el error, estos compensadores [96] y sus desfases característicos en torno a $\pi/2$ [150], han sido utilizados en estas referencias polarimétricas con éxito. Por otro lado, como se ha visto en la sección 2.3.3, el cálculo de los parámetros de la matriz de Mueller a partir de un SP resulta bastante sencillo para desfases en torno a 90⁰ en los retardadores.

No obstante, el uso de una pareja de láminas $\lambda/4$ óptimas para el PSG y el PSA ha requerido de algunas pruebas. Entre cuatro láminas $\lambda/4$ de orden cero a 632,8 nm, dos de ellas de procedencia desconocida (Láminas 1 y 2), y otras dos fabricadas por *Edmund Optics* (Láminas 3 y 4), se realizó una medida de elipticidades para concretar cuales de ellas eran susceptibles de ser utilizadas a modo de *compensadores gemelos* para el PSG y el PSA. En la fig. 4.3 se muestran los resultados obtenidos para una medida de elipticidad. Dicha medida se ha realizado situando, entre un polarizador y un analizador, una lámina, cuyo eje rápido forma 45⁰ con el eje del polarizador. De esta forma se consigue, idealmente, un haz emergente de la lámina que está circularmente polarizado. Si se cumple esto, la elipticidad (ϵ) debería ser igual a 1, y la intensidad emergente del analizador será la misma independientemente de la orientación del analizador. No obstante, las láminas son reales y, por tanto, presentan variación respecto al comportamiento ideal. La fig. 4.3(a) muestra los resultados obtenidos al girar el analizador 360^0 a partir de una orientación de 90⁰ tomando como origen el eje del polarizador de entrada. La



Figura 4.3: Medidas de elipticidad de las láminas retardadoras realizadas con dos detectores distintos.

elipticidad descarta completamente la Lámina 2, ya que presenta una variación considerable, en torno a un ± 10 %. Las Láminas 3 y 4, por su parte, presentan ciclos muy parecidos, es decir, presentan una orientación semejante en sus ejes rápidos. La Lámina 1, pese a mejorar la elipticidad de la Lámina 3, no se asemeja en su comportamiento a la Lámina 4 tanto como la Lámina 3. Tanto los máximos como los mínimos de la Lámina 3 se aproximan más a los valores de la Lámina 4. En base a esto se decidió utilizar la Lámina 1 como regulador de la intensidad de entrada en el sistema polarimétrico (situación previa al PSG), mientras que se colocaron la Lámina 3 en el PSG y la Lámina 4 en el PSA.

La posterior elección de un detector más indicado para el montaje experimental (que se abordará en el próximo epígrafe), obligó a repetir las medidas de elipticidad realizadas para las láminas 1 y 2, debido a los pobres resultados obtenidos con el Detector 1. Como se aprecia tanto en la fig. 4.3(b) como en la tabla 4.2, los resultados obtenidos para el Detector 2 mejoran considerablemente los anteriores, al tiempo que corroboran la semejanza entre los ciclos de la Lámina 3 y la Lámina 4, manteniendo la forma de las curvas y la diferencia de elipticidades.

	L 1	L 2	L 3	L 4	$L \ 3 \ (Det. \ 2)$	$L \not = (Det. 2)$
Elipticidades	0,95	0,89	0,94	0,95	0,98	0,97

Tabla 4.2: Elipticidades de las láminas retardadoras.

4.1.3. Otros Elementos

Existen, además de los componentes puramente polarimétricos, una serie de elementos que resultan muy importantes en la precisión experimental. Tales elementos buscan la versatilidad del dispositivo (pudiendo realizar medidas en distintas configuraciones), mejoran la resolución angular, permiten la selección del blanco sobre la muestra o posibilitan la automatización de las medidas.

Detectores

Para la realización de las medidas se pensó en dos tipos de detectores. El primero de los detectores utilizado (Detector 1) fue un foto-receptor de Silicio (modelo 1801 del fabricante NewFocus), cuya señal era monitorizada por medio de un Lock-In Amplifier (modelo 7225 DSP de la marca Signal Recovery Ametek) sincronizado con un modulador o Chopper (modelo 197 de la marca Signal Recovery Ametek). La detección síncrona permite evitar efectos incoherentes y mejorar la relación señal-ruido. Este tipo de detector es semejante al utilizado, por ejemplo, en la referencia [60]. El segundo de ellos (Detector 2), consta de un cabezal foto-receptor de Silicio (modelo 918-SL de la marca Newport), con monitorización de la temperatura, conectado a un Potenciómetro (1930-C de la marca Newport).

El cabezal foto-receptor del Detector 1, cuyo área de detección activa tiene un diámetro de 0,4 mm, es válido para uso en medidas sobre longitudes de onda comprendidas entre 320 y 1000 nm. Sin embargo, presenta saturación en la detección para una luz cuya potencia supere los 110 μ W a una longitud de onda de 800 nm. Para probar la linealidad del detector y su proceso de saturación frente a



Figura 4.4: Medidas de linealidad en el Detector 1 para $\lambda = 633$ nm. OD = 0 corresponde a una potencia incidente de 5 mW.

la intensidad luminosa, fueron realizadas varias medidas modificando la potencia que incidía sobre él por medio de la adición de diversas OD. En la fig. 4.4(a) se aprecia claramente el proceso de saturación que tiene lugar al incidir sobre el detector con una potencia cada vez mayor. Por otra parte, en la fig. 4.4(b) se puede apreciar la excelente linealidad que el mismo detector presenta para unas intensidades luminosas entre 10 y 0,1 μ W, que se corresponden con unas OD entre 2,8 y 4,0, aproximadamente.

El Detector 2, por su parte, presenta una excelente curva de calibrado del cabezal foto-receptor y selecciona la lectura en ventanas de $\Delta \lambda = 1$ nm, estando indicado para medidas en un intervalo de longitudes de onda entre 400 y 1100 nm. La respuesta del mismo está certificada para un rango de potencias que oscila entre los 3 pW (con una precisión de 0,1 pW y un fondo de escala de 0,01 pW) y los 2 W. Las medidas de potencias superiores a 1 mW deben ser realizadas utilizando la OD 3 incorporada en el cabezal a tal efecto, cuya respuesta está calibrada en el controlador para cada longitud de onda.

Detector 1					Detector 2						
(1,000	$0,\!042$	0,042	-0,005		/ 1,000	-0,008	-0,008	0,003			
0,071	$0,\!878$	0,000	-0,005		0,015	0,989	0,000	0,001			
0,009	0,000	0,880	-0,017		0,000	0,000	0,989	-0,016			
0,002	-0,007	0,014	1,000		-0,004	0,003	-0,004	1,000			

Tabla 4.3: Matrices de calibrado para los dos detectores en idéntica configuración experimental. Idealmente deben reproducir la matriz identidad, algo a lo que se aproxima más el Detector 2.

Pese a que el Detector 1 presentaba un comportamiento bueno en su zona lineal, el escaso rango dinámico de intensidades sobre el que se podían realizar medidas con el mismo limitaba su uso, introduciendo, además, errores de medida debidos a mala relación señal-ruido presente en los mínimos de detección. Un razonamiento sencillo demuestra que, si se utiliza un láser que emite en el orden de los mW y que es limitado con una OD 3, la potencia mínima emergente del sistema, si se extingue la señal con un polarizador que presenta una OD superior a 4 para estados de polarización cruzados, será del orden de los 0,1 nW, en incidencia directa y sin ningún elemento óptico absorbente o difusor intermedio. Esto limita enormemente las posibilidades del dispositivo en cuestión, pues las lecturas del detector en experimentos de difusión podrían ser confundidas con el ruido de fondo. Para corroborar el razonamiento, fue realizada una comparación experimental tras la cual el Detector 2 resultó elegido, ya que su rango dinámico permitía ampliar las capacidades del dispositivo experimental. En dicha comparativa se hicieron sendas calibraciones del DRCP (el proceso de calibración para el DRCP se describirá detalladamente en el apartado 4.2.1) en ausencia de sistema difusor (véase tabla 4.3), utilizando un montaje primitivo que constaba únicamente de un PSG y un PSA entre el láser y el detector, bajo las mismas circunstancias para ambos detectores. Los resultados confirmaron, sin lugar a duda, que el detector que disminuía el error y la incertidumbre en la medida era el Detector 2 (en adelante, el Detector).

Diafragmas y Lentes

Una primera lente de focal larga es necesaria antes del PSG para colimar el haz, compensando, en la medida de lo posible, su divergencia, la cual es característica del láser. Dado que no se tenían datos del fabricante, pues el láser ya había sido descatalogado, se realizaron sendas medidas del perfil del haz láser. En la fig. 4.5(a) se muestran los perfiles del haz a, aproximadamente, 1 m de la ventana de salida del láser (unos centímetros antes de la posición donde se sitúa la muestra). Ambos perfiles han sido ajustados a un haz gausiano, como se aprecia en la fig. 4.5(b). Las medidas fueron realizadas con un array CCD (2048 detectores colocados en línea, con unas dimensiones de 14 × 200 μ m) conectado a un ordenador portátil mediante el que se monitorizaba la medida con el programa de control y adquisición de datos *Caliens v4.4*. Los resultados de las medidas, obtenidos situando entre el PSG y el array CCD una OD 6 (una OD 3 contenida en la montura del array y una OD 3 añadida) para evitar dañar el sensor o saturar la señal, mostraron unas anchuras de haz ($2\omega_0$) de 1,166 y 0,692 mm, dependiendo de si la medida se realizaba sin lente o con ella. La lente utilizada en la medida fue un doblete acromático que se detallará a continuación.

Se decidió utilizar como lente de entrada un doblete acromático de focal $f_1 = 1000$ mm, en adelante denominado Lente 1, con el que se realizaron las medidas del perfil del haz láser. Esta lente era ideal para evitar aberración cromática, pérdidas de intensidad selectivas y variabilidad en la anchura y concentración de haz si se decidía utilizar en alguna de las medidas el láser Ar:Kr o una fuente policromática (aunque el tamaño teórico del spot dependa de la longitud de onda, el uso del doblete garantiza un comportamiento homogéneo de la lente a lo largo de un rango espectral). La Lente 1 presenta un recubrimiento anti-reflejante para un rango espectral de 400 a 700, con una focal de 1000 mm y un desplazamiento focal en función de la longitud de onda inferior al 0,05 %, según las estimaciones de la marca fabricante (*Thorlabs*).

A la salida del PSG y antes de la muestra se sitúa un diafragma, que reduce los reflejos y spots secundarios, típicos de un proceso de alineación correcto y que introducen errores en las medidas experimentales. Conocido el ancho estándar del haz se escogió un diafragma con un diámetro de 5 mm (Diafragma 1).



Figura 4.5: Perfil del haz láser (He:Ne) en la posición de la muestra.

Para mejorar la salida del PSA, preservar una cierta homogeneidad en la iluminación sobre el detector (independientemente de la configuración polarimétrica elegida) y recoger la máxima energía posible manteniendo un mínimo de resolución angular del dispositivo, se añadieron un diagrama ajustable (Diafragma 2) y un segundo doblete acromático (Lente 2) de focal corta (50 mm), que actúa expandiendo el haz (ver fig. 4.1). Las distancias relativas entre estos dos elementos, el detector y la

muestra fueron fijadas de forma que se consiguiera una resolución angular igual o inferior a los $0,5^0$ de arco, y permitiendo que el ancho del haz, una vez expandido por la Lente 2, ocupara la práctica totalidad del área activa del detector.

En la tabla 4.4 se presentan las distintas distancias entre elementos ópticos, así como sus diámetros, de acuerdo con la nomenclatura de la fig. 4.1. Las distancias d_2 , d_3 y d_4 son fijas, ya que todos los elementos se han distribuido, alineado y nivelado en una misma montura óptica. De acuerdo a la configuración mostrada en la fig. 4.1 y la tabla 4.4, las posiciones y diámetros efectivos del Diafragma 2, la Lente 2 y el Detector, preservan una resolución angular del dispositivo superior a 0.25^{0} para medidas en transmisión directa. Esta misma configuración, como ya se dijo, garantiza una resolución de 0.50^{0} en cualquier tipo de medida de reflexión o difusión, con la salvedad de que si fuera necesario, con sólo disminuir la distancia d_5 se conseguiría aumentar la energía recibida en la detección (medidas de muy baja iluminación) con una pérdida de resolución angular que, en todo caso, podría ser cuantificada.

d_1	d_2	d_3	d_4	d_5
158,7	155,5	42,0	83,4	112,3
ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4	ϕ_5
16,0	34,0	5,4	20,0	11,3

Tabla 4.4: Distancias entre elementos ópticos y diámetro de los mismos (mm).

Resolución Angular y Eficiencia Luminosa

Puesto que vamos a estudiar la dependencia angular de la matriz de Mueller, es importante conocer la resolución angular, es decir, la magnitud del ángulo en torno a un valor medio dado, cuyo ángulo sólido va a ser integrado en cada medida. Como se dijo con anterioridad, el ancho transversal del haz en la posición de la muestra es $2\omega_0 \simeq 0.7$ mm. El ancho real en una muestra consistente en una superficie plana resulta ser dependiente del ángulo de incidencia, y será:

$$2\omega_m \simeq \frac{2\omega_0}{\cos\theta_i} \tag{4.1}$$

Si el spot iluminado va a ser observado con un sistema detector, es importante conocer la dimensión transversal que subtiende este spot visto desde el detector (para el detector, este es el tamaño del objeto difusor):

$$2\omega_{sca} \simeq 2\omega_0 \frac{\cos\theta_{sca}}{\cos\theta_i} \tag{4.2}$$

La distancia entre la muestra y el Diafragma 2 es aproximadamente 4 veces la distancia existente entre el diafragma y la Lente 2. De esta forma, dada la relación de distancias y el arco de ángulo subtendido por el Diafragma 2 $\left(\frac{\phi_3/2}{d_1 + d_2 + d_3} \simeq 26'\right)$, el ancho de haz que llega a la Lente 2 es de unos 7 mm ($\phi_3 \pm 20$ %). Dado que la Lente 2 tiene una focal de 50 mm, la apertura del haz a la salida de la misma es de 8⁰, lo que implica un diámetro de haz de unos 7 u 8 mm, a una distancia $d_5 \sim 112$ mm de la lente. Como se muestra en la tabla 4.4, el diámetro del Detector es mayor que esta cantidad, es decir, recoge toda la energía que pasa por el Diafragma 2 en iluminación difusa. Esta configuración geométrica tiene varias propiedades:

- 1. Se preserva la iluminación de cierta extensión del detector en medidas difusas ($\phi_{\text{útil}} \simeq 8 \text{ mm}$) o especulares ($\phi_{\text{útil}} \simeq 2 \text{ mm}$), lo que es bueno para su funcionamiento.
- 2. Se mantiene una buena resolución angular del dispositivo ($\sim 0,5^0$). No obstante, la resolución se puede reducir si la energía que llega al detector es demasiado baja.

Motores y Posicionadores

El DRCP requiere de un movimiento preciso y controlado en ambos compensadores, producido por sendos rotores de velocidad sincronizada. Si se pretende controlar el ángulo de incidencia sobre la muestra y la orientación del PSA, son necesarios otros dos rotores, en este caso de eje vertical. Estos grados de libertad aumentan las posibilidades del polarímetro y lo hacen más versátil. Por otro lado, si se pretende ajustar la ubicación del plano de scattering, es necesario el uso, por lo menos, de una plataforma con control de la inclinación (tilt) para la muestra. Además, para controlar de forma precisa el punto de incidencia del haz de luz sobre la muestra es necesario el uso de posicionadores que permitan el movimiento en los ejes X, Y y Z ($X \in Y$ en el plano de la plataforma tilt y Z hacia arriba, fig. 4.1). Estos ejes permiten, como mínimo, que el punto de iluminación esté sobre los ejes de rotación, tanto de la muestra como del sistema PSA. Para muestras planas en difusión o reflexión, es necesario añadir un soporte para la muestra, que también cuente con un tilt de control de inclinación, de forma que los ejes de rotación de la muestra y el PSA estén contenidos en el plano de la muestra. A continuación se detallarán las especificaciones de todos estos motores y posicionadores, con objeto de mejorar la comprensión acerca de la funcionalidad de los dispositivos elegidos.

- Rotores para las Láminas: Se trata de dos dispositivos de rotación paso a paso, cuya precisión angular es de $360^{0}/(1600 \text{ pasos}) = 0.225^{0}\text{paso}^{-1}$. Ambos están controlados por un driver conectado al ordenador de control mediante una interfaz RS-232 y permiten el giro en ambos sentidos. El tiempo que los rotores tardan en realizar un giro de 360^{0} es inferior a los 15 s, a partir de esta cantidad se pueden extrapolar las duraciones de los ciclos de medida automáticos. Se encuentran situados con su eje de giro en posición horizontal, sobre posicionadores y elevadores manuales, que permiten una alineación precisa de las láminas compensadoras incorporadas en su montura.
- **Rotor ITL:** Es un rotor paso a paso (ITL09), de la casa *MicroControle*, controlado mediante un *driver* (o controlador) que permite trabajar de forma manual o remota, vía interfaz *GPIB*, pudiendo así realizar el giro manualmente o de forma automática, con el ordenador de control. Las características de este rotor permiten un momento de inercia máximo adaptado a nuestras necesidades, realizando su movimiento mediante la implementación de una rampa de aceleración y deceleración adecuada al momento de inercia que presenta el brazo móvil sobre el que se sitúan los componentes del PSA. La precisión angular del rotor ITL es de 0,001⁰, y la carga máxima que puede soportar es muy superior a la que presenta el brazo móvil anclado al mismo, que ha sido diseñado para la colocación del PSA. Puede realizar giros de ±270⁰, controlando el ángulo de scattering (θ_{sca}). Para evitar cabeceo del brazo móvil, se ha equilibrado el peso del PSA contrapesando el lado opuesto del brazo. A continuación se presentan los cálculos sobre el momento de inercia y rampa de aceleración realizados:

La configuración irregular del brazo móvil y los soportes que sobre el se sitúan hacen que se plantee el problema del cálculo del momento de inercia (I) del mismo como si se tratara de una elipse, de semieje mayor b, que gira sobre su semieje menor (c):

$$I \approx \frac{m}{5}(b^2 + c^2) \approx \frac{m}{5}(0.25 + 0.0225) \approx \frac{m}{5}(0.28)$$
(4.3)

haciendo una sobrestimación de los valores. La masa del brazo más la de los elementos del PSA y los contrapesos está entre los 10 kg y los 15 kg, con lo cual el momento de inercia será:

$$I \in \begin{cases} > 2(0,28) = 0,56 \text{ kgm}^2 \\ y \\ < 3(0,28) = 0,84 \text{ kgm}^2 \end{cases}$$
(4.4)

Ambos valores son inferiores a los especificados por el fabricante (1 kgm²). A continuación se calculó una rampa de velocidades lo suficientemente progresiva que no supusiera peligro para la integridad del rotor. Se estimó oportuna una velocidad mínima de $0,050^{0}$ s⁻¹ y una máxima de $0,250^{0}$ s⁻¹, con un periodo de aceleración de 10 s. De forma que el tiempo en alcanzar la velocidad máxima es de 2 s, y la distancia recorrida para ello es de $0,3^{0}$. Del mismo modo, el tiempo que el

rotor tarda en detenerse y la distancia necesaria, una vez alcanzada la velocidad máxima, son 2 s y 0.3^0 , respectivamente. Como es lógico, cualquier distancia angular Θ que se pretenda recorrer de forma automática, superior a 0.6^0 , deberá llevar asociado un tiempo de espera, cuya duración viene dada por los 4 s correspondientes a aceleración y deceleración, y el tiempo que utiliza el rotor en realizar un desplazamiento angular de $\Theta' = \Theta - 0.6^0$ a una velocidad de 0.250^0s^{-1} . Asimismo, para distancias inferiores a 0.6^0 será necesario calcular los tiempos utilizados en los periodos de aceleración y deceleración, si se precisa realizar un movimiento automático, para evitar cruces de instrucciones y optimizar los tiempos de medida.

El rotor ITL está situado en posición horizontal sobre el banco de trabajo, con su eje de giro centrado y alineado con el haz láser y el PSG, situado a una distancia de 1 m del láser. El brazo móvil tiene un radio de 55 cm.

- **Rotor NW:** Motor de giro y driver de la casa *Newport*, de operación manual o remota, vía interfaz *GPIB*. Puede realizar giros de $\pm 360^{\circ}$ con una precisión de $(0,0001)^{\circ}$. Su velocidad de giro está indicada para soportar poca carga, aunque suficiente como para situar la montura de los Nanoposicionadores *XYZ*, un *tilt* y una muestra plana sobre él. Se encuentra anclado sobre una plataforma *tilt* (fig. 4.1) que permite su posicionamiento en horizontal y paralelo al haz láser por medio de la variación de los ángulos libres ξ_1 y ξ_2 . Una vez está alineado, su eje de giro coincide con el del rotor ITL. Controla el ángulo de incidencia sobre la muestra (θ_i).
- Nanoposicionadores XYZ: Se trata de una montura de la casa Newfocus, que permite el movimiento en tres direcciones ortogonales $X, Y \neq Z$. En ella se sitúan tres picomotores de desplazamiento lineal (uno por dirección), controlados por una unidad *iPico* (interfaz para picomotores) de la misma casa, que permite su manejo remoto mediante un Joystick o con el ordenador. A pesar de que la precisión de estos motores ronda los 30 nm, con una amplitud de desplazamiento máxima de 13 mm, la utilidad que se les dará, al menos por el momento, será la de situar la muestra manualmente por medio del Joystick en el centro de giro del rotor (ajuste fino en Y, fig. 4.1) y mover el punto de impacto del haz láser en las muestras planas que así lo requieran (ajuste en X y Z). Si bien podrían ser utilizados para reproducir medidas en una misma posición o a lo largo de varias posiciones perfectamente determinadas, en caso de implementar su control por medio del ordenador.

Los Nanoposicionadores sólo son utilizados en medidas de muestras planas por reflexión o scattering, siendo desmontados para medidas de transmisión, reflexión por prismas o difusión en volumen (muestras coloidales).

Soporte para muestras planas: Es un soporte plano que se ancla en la plataforma vertical de los Nanoposicionadores (figs. 4.1 y 4.6(b)). Consta de un *tilt* que varía los ángulos φ_1 y φ_2 , con la posibilidad de girar sobre sí mismo, de forma que también se puede controlar manualmente el ángulo φ_3 . Estos tres ángulos se corresponden con rotaciones sobre los ejes X, Z e Y, respectivamente.

En las imágenes de las figs. 4.6 y 4.7 se muestra la distribución de los elementos '*in-situ*' con instantáneas tomadas en el laboratorio. En la fig. 4.6(a) se muestra el dispositivo sin Diafragma 1 y sin Nanoposicionadores, con un prisma en la posición de la muestra. La fig. 4.6(b) ilustra la zona donde se ubica la muestra, en la que se pueden apreciar los distintos elementos descritos en la fig. 4.1. Por último, en la fig. 4.7 se pueden apreciar ambas partes del montaje experimental: La entrada, en la que se sitúan el láser y el PSG, y la salida, en la que están colocados el PSA y el Detector.

4.2. Puesta en Marcha y Calibrado

Teniendo en cuenta la base teórica expuesta en la sección 2.3.3, a continuación profundizaremos en el funcionamiento de los dos diseños de polarímetro (DRCP y SP): Sus características, sus ángulos de referencia, los protocolos de calibrado y trabajo de ambos polarímetros, y una serie de medidas y tests que corroboran su funcionalidad, precisión y eficiencia.



(a) Fotografía del Polarímetro.



(b) Detalles del Montaje.

Figura 4.6: Fotografías del dispositivo polarimétrico.

Para el tratamiento de los elementos del PSA y el PSG se ha recurrido a un desarrollo matricial de los mismos que generará, en última instancia, los ciclos de Fourier (en caso del DRCP) o los estados de polarización independientes (SP) necesarios para la obtención de la matriz de Mueller de la muestra. Las matrices de Mueller de los elementos del polarímetro, independientemente de la configuración polarimétrica utilizada, son (de acuerdo con la tabla 2.1 se usará la nomenclatura $c_x = \cos(x)$ y $s_x = \sin(x)$):

Polarizador: Polarizador lineal con acimut α₁. Su matriz genérica es:

$$P_1(\alpha_1) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & c_{2\alpha_1} & s_{2\alpha_1} & 0\\ c_{2\alpha_1} & c_{2\alpha_1}^2 & s_{2\alpha_1}c_{2\alpha_1} & 0\\ s_{2\alpha_1} & s_{2\alpha_1}c_{2\alpha_1} & s_{2\alpha_1}^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(4.5)

• Lámina 1: Retardador lineal, con acimut β_1 y retardo δ_1 . Si denominamos $K_1 = \frac{k_{21}}{k_{11}}$ a la relación de transmitancias de ambos estados ortonormales (igual a 1 en el caso ideal), $a_1 = 1 + K_1$, $b_1 = 1 - K_1$, $rs_1 = 2\sqrt{K_1} \sin(\delta_1)$ y $rc_1 = 2\sqrt{K_1} \cos(\delta_1)$, podemos escribir su matriz de Mueller como [96]:

$$L_1(K_1,\beta_1,\delta_1) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_1 & b_1 c_{\beta_1} & b_1 s_{\beta_1} & 0\\ b_1 c_{\beta_1} & \Xi_1 & \Xi_3 & -r s_1 s_{\beta_1}\\ b_1 s_{\beta_1} & \Xi_4 & \Xi_2 & r s_1 c_{\beta_1}\\ 0 & r s_1 s_{\beta_1} & -r s_1 c_{\beta_1} & r c_1 \end{pmatrix}$$
(4.6)

donde:

$$\begin{cases} \Xi_1 = \frac{1}{2} \left(rc_1 (1 - c_{2\beta_1}) + a_1 (1 + c_{2\beta_1}) \right) \\ \Xi_2 = \frac{1}{2} \left(rc_1 (1 + c_{2\beta_1}) + a_1 (1 - c_{2\beta_1}) \right) \\ \Xi_3 = \frac{1}{2} s_{2\beta_1} (a_1 - rc_1) \\ \Xi_4 = \frac{1}{2} s_{2\beta_1} (a_1 - rc_1) \end{cases}$$



Figura 4.7: Imagenes del PSG, de la zona donde se sitúa la muestra y del PSA.

• Muestra: Cuya matriz de Mueller característica es $M = \{m_{ij}\}_{i,j=0}^3$.

$$M = \begin{pmatrix} m_{00} & m_{10} & m_{20} & m_{30} \\ m_{01} & m_{11} & m_{21} & m_{31} \\ m_{02} & m_{12} & m_{22} & m_{32} \\ m_{03} & m_{13} & m_{23} & m_{33} \end{pmatrix}$$
(4.7)

• Lámina 2: Retardador lineal, con acimut β_2 y retardo δ_2 . Si denominamos, al igual que en el caso de la Lámina 1, $K_2 = \frac{k_{22}}{k_{12}}$ a la relación de transmitancias entre estados ortonormales, $a_2 = 1 + K_2, b_2 = 1 - K_2, rs_2 = 2\sqrt{K_2} \sin(\delta_2)$ y $rc_2 = 2\sqrt{K_2} \cos(\delta_2)$, su matriz de Mueller es:

$$L_2(K_2,\beta_2,\delta_2) = \frac{1}{2k_{12}} \begin{pmatrix} a_2 & b_2c_{\beta_2} & b_2s_{\beta_2} & 0\\ b_2c_{\beta_2} & \phi_1 & \phi_3 & -rs_2s_{\beta_2}\\ b_2s_{\beta_2} & \phi_4 & \phi_2 & rs_2c_{\beta_2}\\ 0 & rs_2s_{\beta_2} & -rs_2c_{\beta_2} & rc_2 \end{pmatrix}$$
(4.8)

donde:

$$\begin{cases} \Phi_1 = \frac{1}{2} \left(rc_2(1 - c_{2\beta_2}) + a_2(1 + c_{2\beta_2}) \right) \\ \Phi_2 = \frac{1}{2} \left(rc_2(1 + c_{2\beta_2}) + a_2(1 - c_{2\beta_2}) \right) \\ \Phi_3 = \frac{1}{2} s_{2\beta_2}(a_2 - rc_2) \\ \Phi_4 = \frac{1}{2} s_{2\beta_2}(a_2 - rc_2) \end{cases}$$

• Analizador: Polarizador lineal con acimut α_2 . Su matriz genérica es (con $c_x = \cos(x)$ y $s_x = \sin(x)$):

$$P_2(\alpha_2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & c_{2\alpha_2} & s_{2\alpha_2} & 0\\ c_{2\alpha_2} & c_{2\alpha_2}^2 & s_{2\alpha_2}c_{2\alpha_2} & 0\\ s_{2\alpha_2} & s_{2\alpha_2}c_{2\alpha_2} & s_{2\alpha_2}^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(4.9)

• Vector de Stokes incidente: (previo paso por el PSG) Pese a no ser un elemento polarimétrico como tal, es importante caracterizar polarimétricamente el haz incidente, antes de comenzar el desarrollo de los cálculos. Dado que la entrada del PSG está gobernada por el Polarizador, el estado de polarización del haz incidente sólo determinará la intensidad que traspase el Polarizador. En el apartado 4.1.2, se explicó la colocación de una lámina de cuarto de onda previa al PSG. De este modo podemos considerar el haz incidente como un haz de luz despolarizada, sin pérdida de generalidad, cuyo vector de Stokes es:

$$\mathbf{s}_{in} = \begin{pmatrix} 1\\0\\0\\0 \end{pmatrix} \tag{4.10}$$

Vector de Stokes emergente: De igual forma, el vector de Stokes del haz emergente del polarímetro se corresponderá con un haz linealmente polarizado (atraviesa el Analizador) cuyo elemento de interés es la intensidad (parámetro s₀), que varía según el comportamiento del PSG, la muestra y el PSA:

$$\mathbf{s}_{out}(\alpha_1, K_1, \beta_1, \delta_1, m_{ij}, K_2, \beta_2, \delta_2, \alpha_2) = \begin{pmatrix} I \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix}$$
(4.11)

4.2.1. Polarímetro de Compensador Dual Rotatorio (DRCP)

Analizado su fundamento teórico en la sección 2.3.3, resta introducir las características particulares del DRCP. En primer lugar el análisis de Fourier debe desarrollarse de acuerdo a la relación de velocidades entre compensadores, R (ec. 2.114). En el presente trabajo se ha optado por una relación de velocidades R = 5 : 2, de acuerdo a lo propuesto en la referencia [96]. De esta forma se obtienen los siguientes acimuts para ambas láminas retardadoras:

$$\begin{cases} \beta_1 = \omega t \\ \beta_2 = R\omega t + \varphi_2 \end{cases}$$
(4.12)

Como se presenta en la referencia [148], la relación elegida es una de las más adecuadas que se puede implementar para minimizar errores. Además, esta relación de velocidades disminuye en casi un 50 % el tiempo de adquisición de datos necesario para una misma medida experimental respecto de la relación 5 : 1. Son variadas las relaciones de velocidades que se pueden encontrar en la bibliografía $(5:1 \text{ en los artículos originales de Azzam [151] o en algunas otras fuentes más actuales [152, 153], 3 : 2 a modo de prueba en alguna referencia [96] y 5 : 3 en [149, 154, 155]). Sin embargo, los antecedentes mostrados en la referencia [148] son suficientes como para considerar la relación de velocidades 5 : 2 la combinación óptima.$

Resolución matricial de los ciclos de Fourier

Buscando la versatilidad del dispositivo experimental, con ayuda de entornos de calculo simbólico (Matlab, MathCAD y Maple) se revisaron las ecuaciones fundamentales del cálculo de los elementos de la matriz de Mueller del medio, expuestas en la referencia [96], y se reformuló todo el planteamiento teórico. De este modo, se realizó un estudio completo de todos los elementos implicados en el análisis desde el inicio. Finalmente, se generó un nuevo algoritmo de cálculo, cuya validez se ha probado en múltiples medidas y sistemas patrón. Para ello hemos supuesto que ambas láminas presentaban, en un principio, distintos desfases y transmitancias. El vector de Stokes del haz luminoso que emerge de la muestra una vez el haz inicial despolarizado (ec. 4.10) ha pasado por el PSG (ecs. 4.5 y 4.6) será

$$\mathbf{s}^{PSGM} = \begin{pmatrix} s_0^{PSGM} \\ s_1^{PSGM} \\ s_2^{PSGM} \\ s_3^{PSGM} \\ s_3^{PSGM} \end{pmatrix} = M(m_{ij})L_1(k_1, \beta_1, \delta_1)P_1(\alpha_1)\mathbf{s}_{in}$$
(4.13)

En el apéndice A (pg. 155) se presenta un desarrollo detallado del algoritmo de cálculo, a cuyas ecuaciones se hará referencia en el transcurso del presente capítulo. La ec. 4.10 desarrollada da lugar a la ecuación A.1. Por otra parte, la matriz de Mueller del PSA es:

$$A = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{1} \\ \mathbf{A}^{2} \\ \mathbf{A}^{3} \\ \mathbf{A}^{4} \end{pmatrix} = L_{2}(k_{2}, \beta_{2}, \delta_{2})P_{2}(\alpha_{2})$$
(4.14)

donde se han utilizado las ecs. 4.8 y 4.9, y se ha seguido la nomenclatura de la ec. 2.111.

De los elementos obtenidos tras realizar el producto de A y \mathbf{s}^{PSGM} , que da lugar al vector de Stokes del haz emergente que llega al detector, únicamente la intensidad (I en la ec. 4.11) es un observable que se puede medir de forma directa en el laboratorio, como ya se adelantó en la sección 2.3.3. Por lo tanto, para el cálculo de la intensidad sólo son necesarios los elementos de la primera fila (\mathbf{A}^1) de la matriz del PSA, cuya expresión analítica se muestra en la ec. A.2.

De este modo, la ecuación resultante para la intensidad detectada se puede expresar, en términos parecidos a los de la ec. 2.114, como:

$$I = \frac{1}{16} \sum_{i=0}^{14} \frac{1}{8} \left(A_i \sin(i\omega t) + B_i \cos(i\omega t) \right)$$
(4.15)

cuyo desglose es mostrado en las ecs. A.3 a A.6 del apéndice A.

Las amplitudes de los distintos armónicos $(A_i \ y \ B_i)$ se relacionan directamente con los parámetros (desfases, acimuts y transmitancias) del PSA, del PSG, y con los valores de la matriz de Mueller del sistema (m_{ij}) . Las ecs. A.7, A.8 y A.9 (pg. 160) detallan esta relación y dan cuenta del significado de los distintos parámetros.

Número de medidas por ciclo

En un principio cabría esperar que, cuanto más se discretice la medida de un ciclo de Fourier, mejor precisión y resultados se han de obtener. No obstante, tanto los errores experimentales debidos al giro de las láminas, como el tiempo necesario para realizar la medida hacen imprescindible un estudio pormenorizado del número de medidas óptimo para caracterizar un ciclo de Fourier completo.

Si n es el número de posiciones angulares necesarias para completar un ciclo de Fourier, el incremento de posición angular vendrá dado por:

$$\Delta\omega t = \frac{2\pi}{n} \tag{4.16}$$

de forma que la posición angular varía de acuerdo a:

$$(\omega t)_k = (\omega t)_{k-1} + \Delta \omega t, \text{ para } k = 1, 2, \dots, n, \text{ con } (\omega t)_0 = 0$$
 (4.17)

donde a cada posición angular $(\omega t)_k$ le corresponde una intensidad de detección I_k según la ec. 4.15.

Existen un total de 30 amplitudes de Fourier que actúan como incógnitas del sistema, con lo cual es necesario un mínimo de n = 30 posiciones angulares para determinar todas y cada una de las amplitudes de Fourier (25 si se fijan las amplitudes B_0 , A_{11} , B_{11} , A_{13} y B_{13} como contribuciones nulas).

Una vez impuesta la condición de utilizar una relación de velocidades R = 5 : 2, es necesario discernir el número óptimo de incrementos angulares de las láminas retardadoras. Tal y como se muestra en la referencia [153], aquellos métodos de medida basados en transformadas de Fourier presentan un error mucho menor que aquellos basados en la inversión de estados de polarización (técnica del SP) con un total de 4×4 o, incluso, 8×8 medidas de estados de polarización cruzados, invirtiendo un tiempo semejante en orden de magnitud. En esa misma referencia se establece que el método más robusto y estable para realizar estas medidas es el basado en la transformada de Fourier, siendo aceptable cualquier número de incrementos a partir de 36. A continuación se establecerá la cantidad óptima de incrementos para éste dispositivo experimental en concreto. Por otra parte, en la referencia [156] se concluye que, cualquier matriz experimental para la que se realicen un número superior a 9×9 medidas de estados de polarización cruzados, presenta un ruido en sus elementos inferior al de las fluctuaciones de intensidad de la fuente luminosa utilizada.

Dadas las características de los rotores paso a paso que controlan el giro de las láminas (pg. 68), el número máximo de pasos que puede realizar cada uno de ellos para completar un giro es de $360^{0}/0.225^{0} paso^{-1} = 1600$ pasos. Las posibles combinaciones de pasos para dichos rotores con razón 5 : 2 son: 5 : 2 con un total de 800 posiciones angulares (n en la ec. 4.16) o medidas de intensidad, 10 : 4 con 400 medidas, 15 : 6 con 300 medidas, 20 : 8 con 200 medidas, 30 : 12 con 150 medidas, 40 : 16 con 100 medidas y combinaciones que aportan un número de medidas inferior, que no son de interés para nuestro estudio por el aumento de error de medida que llevan asociado.



Figura 4.8: Valores de la matriz de Mueller obtenidos en dos medidas para distintas velocidades de paso de la Lámina 1.

Para evaluar cuál de las posibles relaciones entre motores podría ser la más interesante en este caso, se realizaron dos medidas en vacío para cada una de ellas, en idénticas condiciones de laboratorio representadas en la fig. 4.8. La fig. 4.8(a) muestra los resultados obtenidos para los parámetros diagonales de la matriz de Mueller de vacío (idealmente matriz identidad), mientras que la fig. 4.8(b) muestra los valores de los parámetros fuera de la diagonal (idealmente nulos). Se aprecia cómo, con independencia de los valores obtenidos, la relación de pasos 20 : 8 es la que mayor repetitividad presenta. Por otro lado, observando los valores de la diagonal (fig. 4.8(a)), la relación de pasos 20 : 8 es la que presenta valores más cercanos a 1. Las relaciones de pasos 40 : 16 y 20 : 8 son las que presentan menor dispersión en sus valores m_{ii} . En la fig. 4.8(b) se aprecia cómo la variabilidad en la medida es semejante para la mayor parte de relaciones de pasos, excepto para la relaciones 40 : 16 y 15 : 6, siendo la primera ligeramente superior a la media y la segunda ligeramente inferior. Según estos resultados, la combinación de pasos de motor con relación de velocidades 5 : 2 más adecuada es 20 : 8, que finalmente fue implementada en el dispositivo.

Así pues, la sustitución de las posiciones angulares de la ec. 4.17 en la ec. 4.15 dará lugar, en este caso, a un total de 200 valores experimentales de intensidad, que generarán 200 ecuaciones a partir de las que se podrán estimar las amplitudes de Fourier $(A_i \ y \ B_i)$ minimizando los errores. Los incrementos angulares correspondientes a la relación de pasos 20 : 8 en los motores paso a paso son $4,5^0 \ y \ 1,8^0$ para la Lámina 2 y la Lámina 1, respectivamente.

Generación de Ciclos Teóricos

La generación de ciclos de Fourier teóricos permite, entre otras cosas, testear el funcionamiento de los algoritmos de cálculo de las magnitudes de calibración $(k_{11}, k_{12}, k_{21}, k_{22}, \delta_1, \delta_2, \alpha_1, \alpha_2 \neq \varphi_2)$. Para la generación de un ciclo de Fourier teórico se puede partir tanto de un formalismo de Mueller como de un formalismo de Jones. Por simplicidad se ha utilizado un formalismo de Jones (apartado 2.1). Suponiendo que \mathbf{E}_{in} es el campo eléctrico incidente y J es la matriz de Jones del medio, el campo emergente será:

$$\mathbf{E}_{out} = A(\alpha_2)L(k_{12}, k_{22}, \varphi_2, \delta_2)JL(k_{11}, k_{21}, \varphi_1, \delta_1)P(0)\mathbf{E}_{in}$$
(4.18)

Si se definen los ángulos acimutales de ambas láminas como:

$$\begin{cases} \varphi_1(i) = i\frac{2\pi}{n} + \phi_1 \\ \varphi_2(i) = iR\frac{2\pi}{n} + \phi_1 \end{cases}$$

$$(4.19)$$

donde R = 5 : 2, n es el número de valores de intensidad que se desean medir en el ciclo, i va desde 1 hasta n, ϕ_1 es el acimut inicial de la Lámina 1 y ϕ_2 es el de la Lámina 2. Una vez hayan sido fijados el resto de los parámetros y se haya introducido la matriz de Jones del medio se obtendrán un total de n vectores de Jones del campo emergente. De esta forma, las n intensidades del ciclo de Fourier vienen dadas por:

$$I_k = \mathbf{E}_{out,k}^+ \mathbf{E}_{out,k}, \quad \text{con } k = 1, \dots, n \tag{4.20}$$



Figura 4.9: Ciclos de Fourier teóricos para medias en vacío, según las dos configuraciones de la tabla 4.5.

En la fig. 4.9 se presentan dos ciclos de intensidad, correspondientes a una matriz de Jones identidad (vacío) y a los parámetros de cálculo de la tabla 4.5. Se puede apreciar cómo pequeñas variaciones en los parámetros de cálculo dan lugar a apreciables cambios en los valores de intensidad. Esto, aplicado en orden inverso, viene a corroborar lo que se daba por sabido según distintas referencias: La gran sensibilidad de ésta metodología experimental. Si lo que se pretende es simular un ciclo experimental a partir de una matriz de Mueller o de Jones conocida, la forma de operar sería la misma, con la única condición de sustituir la matriz identidad por la experimental.

	δ_1	δ_2	φ_1	φ_2	α_2	k_{11}	k_{21}	k_{12}	k_{22}
C1	90^{0}	90^{0}	00	00	$22,5^{0}$	1	1	1	1
C2	$90,5^{0}$	$90,1^0$	0	2^{0}	25^{0}	0,9997	1	0,9997	1

Tabla 4.5: Configuraciones para el cálculo de los ciclos de Fourier teóricos de la fig. 4.9.

Calibrado DRCP

Partiendo de las ecs. 4.15, A.7 y A.8, es relativamente sencillo apreciar que, dada una matriz de Mueller conocida $(m_{ij})_{i,j=0}^3$, mediante una medida de un ciclo de Fourier completo, que denominaremos a partir de ahora calibrado, se pueden obtener los valores de los parámetros característicos del polarímetro: k_{11} , k_{12} , k_{21} , k_{22} , δ_1 , δ_2 , α_1 , α_2 y φ_2 . Sin embargo, algunos valores de los ángulos iniciales α_1 , α_2 y φ_2 han de ser evitados para evitar singularidades durante el calibrado [96]. Se ha procurado mantener el protocolo de trabajo lo más claro posible, y los pasos seguidos para realizar el alineado del sistema previo al calibrado han sido siempre los siguientes:

- 1. Colocación del Polarizador de entrada en un ángulo arbitrario, que permanece fijo.
- 2. Giro del Analizador hasta conseguir la extinción en el haz que emerge del Analizador (ambos polarizadores presentan ahora estados ortonormales de polarización: Polarizadores cruzados).
- 3. Colocación de la Lámina 2, y giro hasta volver a una situación de extinción a la salida del Analizador. De esta forma se asegura que Lámina 2 tenga sus lineas neutras alineadas con los ejes del Polarizador y del Analizador.
- 4. Colocación de la Lámina 1 (manteniendo la Lámina 2 colocada), y giro hasta que presente extinción el haz que emerge del Analizador, asegurando así que ambas láminas tengan sus lineas neutras alineadas.
- 5. Para finalizar, el Analizador es girado hasta que presenta un acimut de $22,5^{0}$ con respecto al Polarizador. Este giro se hace de acuerdo a la escala graduada existente en la montura del mismo, cuya precisión es $0,25^{0}$.

Aunque a priori la situación de los ejes de las láminas es desconocida (no se sabe cuál de ellos está alineado con el Polarizador y cuál lo está con el Analizador). Una vez realizados varios procesos de calibración se puede corregir esto, comparando con el gráfico de un ciclo de Fourier teórico (fig. 4.9) y ajustando la posición de las láminas para que reproduzcan la gráfica. En ese punto los ejes rápidos de ambas láminas estarán alineados con el eje del Polarizador. No obstante, la dirección del eje principal será desconocida de cualquier modo, dado que, desde un punto de vista teórico, los acimuts 0^0 y 180^0 con respecto al Polarizador son idénticos.

Puesto que los alineamientos descritos se hacen manualmente, los acimuts se mantendrán como parámetros variables en el calibrado, a excepción de la posición de referencia del Polarizador (al igual que en la generación de ciclos teóricos). Sin embargo, en el desarrollo previo de las amplitudes de Fourier el elemento fijo ha sido la Lámina 1, para facilitar el cálculo simbólico. Ambas situaciones son equivalentes, dado que sólo difieren en una rotación del sistema de coordenadas y, por tanto, se puede suponer desde un punto de vista puramente práctico que el elemento fijo a partir del cual se han alineado el resto de componentes ha sido la Lámina 2.



Figura 4.10: Calibrado del DRCP: Captura de pantalla y comparativa con un ciclo experimental.

El proceso de calibrado continúa con la realización de una medida sobre un sistema conocido. La medida se lleva a cabo mediante la detección síncrona de la intensidad de haz emergente del PSA para cada configuración polarimétrica generada por el PSG y el PSA, es decir, para los 200 pasos que deben realizar los rotores paso a paso que dominan el movimiento de las láminas. Para evitar introducir errores al usar sistemas experimentales sencillos conocidos (también válidos para realizar una calibración, pero de los cuales se desconoce la precisión con la que puede ser dada la matriz de Mueller en la bibliografía) se estimó oportuno realizar los calibrados en vacío, es decir, sin ningún tipo de sistema entre el PSG y el PSA. Obrando de este modo, las únicas fluctuaciones y errores en la medida pueden ser los ocasionados por un alineamiento deficiente, la imperfección nada despreciable de los componentes polarimétricos [157] y el ruido introducido por las partículas suspendidas en el aire y los componentes situados entre el PSA y el detector (Lente y OD 3 del Detector). En la fig. 4.10(a) se presenta una captura de pantalla del programa de control del polarímetro durante un calibrado, mientras que en la fig. 4.10(b) se muestra la comparación entre un ciclo teórico (C1 de la fig. 4.9) y un ciclo de calibrado experimental. La matriz de Mueller del sistema al realizar este tipo de calibrado, como ya se ha adelantado, es la matriz identidad $m_{ij} = I_{4\times 4}$.

Dado que idealmente ambas láminas retardadoras deberían ser iguales, y sus transmitancias deberían ser $k_{ij} = 1$ (con i, j = 1, 2), se podría realizar una primera aproximación en el cálculo, suponiendo que ambas láminas presentan transmitancias iguales. En base a esto, se puede suponer que $K_1 = K_2$. En la referencia [96], además de esta aproximación, se supone que ambas láminas presentan también el mismo desfase entre estados propios. Esta posibilidad, aunque fue considerada en un principio, no se ha implementado pues se supone que la transmitancia es prácticamente la unidad, mientras que los desfases introducidos por ambas láminas, aun valorados por el proveedor en torno a 90° , pueden sufrir ligeras modificaciones. El hecho de considerar desfases distintos en ambas láminas no complica demasiado la resolución de los ciclos de Fourier, y ayuda a tener una magnitud más para realizar el ajuste de calibrado y disminuir los errores del mismo. Sin embargo, considerar diferentes transmitancias da lugar a un sistema de ecuaciones mucho más difícil de resolver, con la consecuente pérdida de tiempo en diseño del algoritmo de resolución y computación (si suponemos que ambas láminas tienen distinta transmitancia, la ec. 4.23, por ejemplo, no tendría una solución única, siendo necesaria la resolución de un sistema de ecuaciones en variables acopladas más complicado). Mantener algunos parámetros de ajuste libres permite una mayor precisión en el calibrado y las medidas del dispositivo, pero es necesario llegar a un compromiso entre el tiempo de resolución de los sistemas de ecuaciones y el número de parámetros libres. Así pues, las ecuaciones con las que finalmente se trabajó en el calibrado son las contenidas en el apéndice A. Si denominamos $C_{10} = B_{10}/A_{10}, C_6 = B_6/A_6$ y $C_4 = B_4/A_4$, a partir de la ec. A.11 es inmediato obtener el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \arctan(C_{10}) = (2\alpha_1 + 2\alpha_2 - 4\varphi_2) \\ \arctan(-C_6) = (2\alpha_1 - 2\alpha_2 + 4\varphi_2) \\ \arctan(C_4) = (2\alpha_1 + 2\alpha_2) \end{cases}$$
(4.21)

cuya solución son los parámetros acimutales de calibrado del sistema:

$$\begin{cases} \alpha_1 = \arctan(C_{10})/4 - \arctan(C_6)/4 \\ \alpha_2 = \arctan(C_4)/2 - \arctan(C_{10})/4 + \arctan(C_6)/4 \\ \varphi_2 = \arctan(C_4)/4 - \arctan(C_{10})/4 \end{cases}$$
(4.22)

Para obtener el valor de los tres parámetros de calibrado restantes $(K, \delta_1 y \delta_2)$ basta con utilizar tres de las ecuaciones en las que aparecen. Estos parámetros están englobados en las ecuaciones de las amplitudes de Fourier A_0 , A_4 , A_6 , A_{10} , B_4 , B_6 y B_{10} . Tenemos, de nuevo, información redundante del sistema. Sin embargo, dado que ya se habían utilizado los cocientes de amplitudes para determinar los parámetros acimutales, se estimó oportuna la posibilidad de hacer un ajuste para minimizar errores por métodos computacionales utilizando las cuatro ecuaciones que se exponen a continuación:

$$\begin{cases}
A_0 = 8a^2 + 2a^2\cos(2\alpha_1 - 2\alpha_2) + 2arc_2\cos(2\alpha_1 - 2\alpha_2) + \dots \\
\dots + 2arc_1\cos(2\alpha_1 - 2\alpha_2) + 2rc_1rc_2\cos(2\alpha_1 - 2\alpha_2) \\
A_4 = 2\cos(2\alpha_1 + 2\alpha_2)(a + rc_2)(a - rc_1) \\
A_6 = 2\cos(2\alpha_1 - 2\alpha_2 + 4\varphi_2)(a - rc_1)(a - rc_2) \\
A_{10} = 2\cos(2\alpha_1 + 2\alpha_2 - 4\varphi_2)(a + rc_1)(a - rc_2)
\end{cases}$$
(4.23)

definiendo los valores de los desfases δ_1 y δ_2 entre 0^0 y 180^0 , y el cociente de transmitancias K entre 0,0 y 1,1. A pesar de que realmente $K \in [0, 1]$, permitir valores fuera de este rango es una condición de ajuste que ayuda a que pequeños defectos en la alineación, en el propio sistema o en el planteamiento teórico de los dispositivos polarimétricos (realizado desde un punto de vista ideal) sean absorbidos por este parámetro, así como por el resto de los parámetros de calibrado.

Para mejorar, en la medida de lo posible, los resultados del calibrado, se ha tomado como protocolo el realizar no una única medida, sino un total de 5 ciclos de calibrado, a partir de los cuales se obtienen 5 sets de parámetros de calibrado, con los cuales se realiza una estadística calculando la media y la desviación estándar de los mismos. Esta forma de actuar asegura el procedimiento, ya que la aparición de valores elevados en la desviación estándar puede ser síntoma de fallos puntuales en el dispositivo, en el proceso de adquisición de datos o, como suele ser habitual, falta de linealidad debido a un proceso de calentamiento insuficiente en el láser. Es por esto que, una vez realizado un calibrado con garantías, se procuran mantener todos y cada uno de los dispositivos en funcionamiento el mayor tiempo posible, para evitar los contratiempos de la puesta en marcha. Los parámetros de calibrado ($\alpha_1, \alpha_2, \varphi_2, K, \delta_1$ y δ_2) son útiles a partir del momento en el que quedan determinados, para cualquier medida que se realice sin modificar las condiciones del polarímetro y las posiciones de los elementos del PSG y del PSA. Durante el desarrollo de esta tesis se ha tenido la precaución de realizar un alineado y calibración del polarímetro cada vez que tenía lugar algún factor que podía influir en la medida (fluctuaciones del láser, cortes de luz, contacto físico involuntario con los componentes, saturación de la comunicación entre el ordenador y los dispositivos,...).

Medida DRCP

El proceso de medida del DRCP es muy parecido al de calibración, con la salvedad de que se realiza con una muestra problema entre el PSG y el PSA. Realmente la diferencia reside en el tratamiento de los datos, y no en la adquisición de los mismos, que se realiza mediante un proceso síncrono idéntico al de calibrado. La duración de un ciclo de Fourier, que consta de 200 datos tanto para calibrado como para medida, es de aproximadamente 10 minutos, dada la configuración actual del polarímetro. La posición de los rotores de control de las láminas, de la muestra y del brazo móvil sobre el que se sitúa el PSA es regida en todo momento por el programa de control. Las alineaciones de las plataformas *tilt* y de los nanoposicionadores se realizan manualmente y mediante el Joystick, respectivamente, una vez es colocada la muestra en su localización definitiva para realizar la medida.

El programa de control, desarrollado expresamente para la automatización del polarímetro en el entorno de trabajo *VEE (HP-Agilent)*, presenta una serie de opciones cuyo objeto es aumentar las posibilidades de trabajo del polarímetro evitando, en la medida de lo posible, requerir la presencia del operario para la realización de medidas "en continuo", es decir, sin necesidad de retirar o manipular la muestra o los elementos del montaje. En la fig. 4.11 se presentan una serie de capturas de pantalla del programa de control del polarímetro. En la primera de ellas (4.11(a)) se muestra el diálogo inicial, en el que se puede elegir entre la realización de medidas estáticas (sin mover el rotor ITL que sustenta el PSA), calibrados o medidas continuas de scattering en tres configuraciones de detección diferentes:

- 1. **Barrido A**: Con el Detector inicialmente en 0^0 y haciendo un barrido para angulos de scattering comprendidos entre 160^0 y -160^0 .
- 2. Barrido B: Con el Detector en 0^0 y haciendo un barrido para angulos de scattering comprendidos entre 160^0 y 0^0 .
- 3. Barrido C: Con el detector en 180^{0} (posición relativa de 0^{0} para esta configuración) y haciendo un barrido para ángulos de scattering comprendidos entre 90^{0} y -90^{0} relativos al centro de la medida (escaneo en la región de *backscattering*, o *backscan*). En esta configuración, los soportes del brazo que sustenta al PSA impiden la medida para los ángulos comprendidos entre 20^{0} y -20^{0} , por lo que, en las futuras representaciones de patrones de scattering realizadas con este método, la región sombreada por el PSA será omitida en la escala angular.

Pese a que la posición inicial del detector puede asociarse a una posición fija determinada (se entiende que el Detector está alineado con el láser en posición 0^0), en cualquiera de los casos el movimiento del



(a) Opciones de inicio



(c) Selección de longitud de onda (Potenciómetro)



(b) Medidas de difusión: Opciones de barrido





Figura 4.11: Capturas de pantalla del programa de control del polarímetro.

rotor ITL es relativo, con lo cual los ángulos de inicio del Detector pueden ser variados a gusto del operario, manteniendo los límites angulares de trabajo para evitar el error de giro del rotor ITL. Por ejemplo, se podría realizar un *Barrido B* indicando que el origen es la posición absoluta 45^{0} , de forma que el Detector operaría, realmente, entre 205° y 45° . Si se ha elegido una medida continua, la siguiente ventana (fig. 4.11(b) para backscan) solicita al operario los límites angulares de trabajo del rotor ITL (con objeto de evitar daños por reflexiones especulares en el detector, medidas erróneas debidas a la configuración experimental o de ahorrar tiempo en la medida de una región de interés), así como el paso angular del rotor ITL (resolución angular) en la medida y el número de medidas a realizar en una misma posición del detector (por si se requiere de una estadística). En caso de medidas estáticas o calibrado, la única opción posible es la del número de medidas a realizar. Tras estos diálogos, el programa solicita el nombre del archivo donde guardará los datos, así como el tiempo de espera antes de comenzar el proceso de medida y la posición inicial del rotor ITL (si, por ejemplo, el operario acaba de realizar un calibrado y desea medir en *backscan*, el programa se encargará de mover el rotor de forma automática desde los 0^0 hasta el ángulo inicial, evitando la molesta espera). Por último, antes de comenzar el proceso de medida en si, se solicita el ajuste de la longitud de onda para la detección (fig. 4.11(c)). Después de estos pasos previos, el programa inicia la medida informando de los movimientos de posicionado del PSA y el Detector que realiza el rotor ITL en cada momento (fig. 4.11(d)), de forma que el operario pueda pausar el programa en esos instantes en los que no perjudica la adquisición de datos. La medida puede ser retomada con toda normalidad en el punto donde se había pausado, siempre y cuando no se hayan manipulado el polarímetro o la muestra durante el periodo de pausa.

Los datos de intensidad leídos por el detector son almacenados, junto con su posición angular absoluta y el número de medida, en el fichero de datos cuyo nombre se indicó al inicio de la experiencia, al que se le añade al final del nombre un código numérico que se corresponde con el instante de inicio de la medida, para evitar la pérdida de información por sobrescritura del fichero. Estos ficheros de datos, al igual que los de calibrado, son procesados con un algoritmo de cálculo simbólico para obtener



Figura 4.12: Captura de pantalla en el transcurso de una medida del DRCP.

finalmente las matrices de Mueller del sistema, que son almacenadas en un nuevo fichero de datos en el que constará también la posición angular y el número de medida para la que se obtuvo cada matriz. En la fig. 4.12 se muestra una captura de pantalla del ordenador de control en el transcurso de una medida de scattering. Se pueden apreciar dos mitades (superior e inferior) con gráficos y lecturas diferenciadas, que se corresponden con la detección para ángulos a izquierda o derecha de la posición central designada en los diálogos iniciales.

4.2.2. Polarímetro SP

Al igual que ocurre con el DRCP, el Polarímetro de Stokes (SP) permite realizar calibrados con objeto de minimizar los errores del dispositivo. Partiendo de lo expuesto en la sección 2.3.3, se puede desarrollar el protocolo de medida y calibración del SP, sin necesidad de modificar los componentes del sistema. El grado de dificultad de las operaciones y algoritmos en el SP disminuye considerablemente con respecto al DRCP, al tiempo que se incrementa el error experimental.

A partir de la ec. 2.110 se pueden obtener un conjunto de 16 valores de intensidad independientes, si se eligen convenientemente las configuraciones polarimétricas adecuadas para la medida. En este caso se han elegido cuatro polarizaciones de entrada, que conforman una base de estados de polarización en el espacio de vectores de Stokes, y se han utilizado las mismas configuraciones a la salida. Es decir, si el láser y el detector intercambiaran su posición, el PSA y el PSG intercambiarían sus funciones, sin que medie modificación alguna. Cruzando estas configuraciones polarimétricas entre sí (cada una de las de entrada con las cuatro de salida) se obtienen 16 valores de intensidad a la salida. Esta elección da lugar a un sistema compatible determinado, en el que las incógnitas, tras el pertinente calibrado de las variables de entrada, serán los elementos de la matriz de Mueller del sistema. Las polarizaciones elegidas son:

- Luz circularmente polarizada, giro de la Lámina 1: $\varphi_1 = -45^0$.
- Luz linealmente polarizada (polarizada en el plano de giro de los rotores dentro de la configuración experimental utilizada); giro de la Lámina 1: $\varphi_1 = 0^0$.
- Luz elíptica; giro de la Lámina 1: $\varphi_1 = 30^0$.
- Luz elíptica; giro de la Lámina 1: $\varphi_1 = 60^0$.

Calibrado SP

En este caso, las variables internas susceptibles de ser ajustadas en el calibrado, según la exposición de la sección 2.3.3, son el acimut del Analizador (α), los acimuts de ambas láminas retardadoras (β_1 y β_2), y el desfase de las mismas (δ , consideradas idénticas y con la transmitancia de sus estados propios ideal). Se supone que el origen de acimuts está definido por el estado de polarización del Polarizador

de entrada (fijo, polarización horizontal respecto al plano de giro de los rotores). La alineación de componentes se realiza del mismo modo que en el DRCP, con la única salvedad de situar el Analizador en posición 0⁰ al finalizar el proceso. De este modo, recurriendo a un desarrollo matricial del PSG, la muestra $((m_{ij})_{i,j=0}^3)$ y el PSA, el vector de Stokes del haz que llega al detector es:

$$\mathbf{s}_{out} = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 1 & c_{2\alpha} & s_{2\alpha} & 0 \\ c_{2\alpha} & c_{2\alpha}^2 & c_{2\alpha}s_{2\alpha} & 0 \\ s_{2\alpha} & c_{2\alpha}s_{2\alpha} & s_{2\alpha}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{2\gamma_2}^2 + (2s_{2\gamma_2}^2c_{\delta}) & c_{2\gamma_2}s_{2\gamma_2}(1-2c_{\delta}) & -(2s_{2\gamma_2}s_{\delta}) \\ 0 & c_{2\gamma_2}s_{2\gamma_2}(1-2c_{\delta}) & s_{2\gamma_2}^2 + (2c_{2\gamma_2}^2c_{\delta}) & (2c_{2\gamma_2}s_{\delta}) \\ 0 & 2s_{2\gamma_2}s_{\delta} & (-2)c_{2\gamma_2}s_{\delta} & 2c_{\delta} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \cdot \\ \cdot \begin{pmatrix} m_{00} & m_{01} & m_{02} & m_{03} \\ m_{10} & m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{20} & m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{30} & m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{2\gamma_1}^2 + (2s_{2\gamma_1}^2c_{\delta}) & c_{2\gamma_1}s_{2\gamma_1}(1-2c_{\delta}) & -(2s_{2\gamma_1}s_{\delta}) \\ 0 & 2s_{2\gamma_1}s_{\delta} & (-2)c_{2\gamma_1}s_{\delta} & 2c_{\delta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(4.24)

donde se ha utilizado $c_x = \cos x$, $s_x = \sin x$, $\gamma_1 = \beta_1 + \varphi_1$ y $\gamma_2 = \beta_2 + \varphi_2$.

El proceso de calibrado, al igual que sucedía en el caso del DRCP, se realizará en vacío, por lo que la matriz de Mueller del sistema será sustituida por la matriz identidad $m_{ij} = I_{4\times4}$, de forma que la intensidad detectada en función de los parámetros de calibrado y los giros introducidos en las láminas será:

$$I = \frac{1}{16} \left[-c_{2\alpha} \left((c_{2\gamma_1}^2 + 2c_{\delta}s_{2\gamma_1}^2) (c_{2\gamma_2}^2 + 2c_{\delta}s_{2\gamma_2}^2) - \dots \right. \\ \left. \dots - 4s_{2\gamma_1}s_{2\gamma_2}s_{\delta}^2 + c_{2\gamma_1}c_{2\gamma_2}s_{2\gamma_1}s_{2\gamma_2}(2c_{\delta} - 1)^2 \right) + \dots \\ \left. \dots + s_{2\alpha} \left(-4c_{2\gamma_2}s_{2\gamma_1}s_{\delta}^2 + c_{2\gamma_1}s_{2\gamma_1}(2c_{\delta} - 1)(2c_{\delta}c_{2\gamma_2}^2 + s_{2\gamma_2}^2) + \dots \right. \\ \left. \dots + c_{2\gamma_2}s_{2\gamma_2}(2c_{\delta} - 1)(c_{2\gamma_1}^2 + 2c_{\delta}s_{2\gamma_1}^2) \right) + 1 \right]$$

$$(4.25)$$

De este modo, al realizar una medida de calibrado en vacío, se obtendrán un total de 16 ecuaciones y 4 incógnitas (ya que los giros introducidos en las láminas, φ_1 y φ_2 son parámetros de control perfectamente determinados y para cada par de valores se obtendrá una intensidad de detección, hasta un total de 16 intensidades). Los valores de esas incógnitas que minimizan los errores de ajuste del sistema son los parámetros de calibrado del sistema. El protocolo de calibrado del SP es el mismo que el seguido en el DRCP: Se toman 5 lecturas completas y sobre los parámetros de calibrado obtenidos para cada lectura se realiza una estadística, para conocer la dispersión y, de paso, evitar algún valor defectuoso que pueda aparecer.

El programa de control del polarímetro es similar al del caso dinámico, salvo en lo que respecta a la realización del ciclo de medidas, que se ha modificado para que lean un total de 16 datos correspondientes a las 16 configuraciones polarimétricas. El tiempo necesario para hacer una medida de calibrado es de aproximadamente 5 minutos, la mitad del utilizado por el DRCP (para realizar 16 medidas frente a las 200 del DRCP). Esta reducción en el tiempo de adquisición de datos no compensa, como se podrá ver en la sección 4.3, la pérdida de precisión del dispositivo.

Medida SP

Una vez obtenidos los 4 parámetros de calibrado (α , β_1 , β_2 y δ), si se realiza un set de medidas sobre un sistema problema, la sustitución de los mismos y de los giros introducidos en las láminas dará lugar a un total de 16 ecuaciones cuyas 16 incógnitas son los elementos m_{ij} de la matriz de Mueller de dicho sistema. De acuerdo con la ec. 4.24, la intensidad en función de los parámetros de calibrado, los giros de las láminas y los elementos m_{ij} será:

$$I = \frac{1}{16} \left[m_{00} - m_{01}(c_{2\gamma_{1}}^{2} + 2c_{\delta}s_{2\gamma_{1}}^{2}) - c_{2\alpha} \left\{ -(c_{2\gamma_{2}}^{2} + 2c_{\delta}s_{2\gamma_{2}}^{2}) \left(m_{10} - m_{11}(c_{2\gamma_{1}}^{2} + 2c_{\delta}s_{2\gamma_{1}}^{2}) - \dots \right) \right. \\ \left. \dots - 2m_{13}s_{2\gamma_{1}}s_{\delta} + m_{12}c_{2\gamma_{1}}s_{2\gamma_{1}}(2c_{\delta} - 1) \right) + 2s_{2\gamma_{2}}s_{\delta} \left(m_{30} - m_{31}(c_{2\gamma_{1}}^{2} + 2c_{\delta}s_{2\gamma_{1}}^{2}) - 2m_{33}s_{2\gamma_{1}}s_{\delta} + \dots \right) \\ \left. \dots + m_{32}c_{2\gamma_{1}}s_{2\gamma_{1}}(2c_{\delta} - 1) \right) + c_{2\gamma_{2}}s_{2\gamma_{2}}(2c_{\delta} - 1)(m_{20} - m_{21}(c_{2\gamma_{1}}^{2} + 2c_{\delta}s_{2\gamma_{1}}^{2}) - 2m_{23}s_{2\gamma_{1}}s_{\delta} + \dots \right) \\ \left. \dots + m_{22}c_{2\gamma_{1}}s_{2\gamma_{1}}(2c_{\delta} - 1) \right] + s_{2\alpha} \left\{ (2c_{\delta}c_{2\gamma_{2}}^{2} + s_{2\gamma_{2}}^{2})(m_{20} - m_{21}(c_{2\gamma_{1}}^{2} + 2c_{\delta}s_{2\gamma_{1}}^{2}) - 2m_{23}s_{2\gamma_{1}}s_{\delta} + \dots \right) \\ \left. \dots + m_{22}c_{2\gamma_{1}}s_{2\gamma_{1}}(2c_{\delta} - 1) \right] + 2c_{2\gamma_{2}}s_{\delta} \left(m_{30} - m_{31}(c_{2\gamma_{1}}^{2} + 2c_{\delta}s_{2\gamma_{1}}^{2}) - 2m_{33}s_{2\gamma_{1}}s_{\delta} + \dots \right) \\ \left. \dots + m_{32}c_{2\gamma_{1}}s_{2\gamma_{1}}(2c_{\delta} - 1) \right] - c_{2\gamma_{2}}s_{2\gamma_{2}}(2c_{\delta} - 1)(m_{10} - m_{11}(c_{2\gamma_{1}}^{2} + 2c_{\delta}s_{2\gamma_{1}}^{2}) - 2m_{13}s_{2\gamma_{1}}s_{\delta} + \dots \right) \\ \left. \dots + m_{12}c_{2\gamma_{1}}s_{2\gamma_{1}}(2c_{\delta} - 1) \right] - 2m_{03}s_{2\gamma_{1}}s_{\delta} + m_{02}c_{2\gamma_{1}}s_{2\gamma_{1}}(2c_{\delta} - 1) \right]$$

$$(4.26)$$

En la fig. 4.13 se muestra una captura de pantalla del polarímetro SP en una medida estática. Al igual que ocurría en el DRCP las opciones de colocación para la medida y los diálogos de inicio permiten el trabajo del dispositivo en todas las configuraciones expuestas en la sección 4.2.1, de forma que el programa de control automatiza la medida de igual forma que lo hacía para el DRCP. Asimismo, el tratamiento de los datos se ha realizado de acuerdo al algoritmo expuesto en este punto, por medio de un entorno de cálculo numérico.



Figura 4.13: Captura de pantalla en el transcurso de una medida del SP.

4.3. Medidas en Sistemas Sencillos

Los calibrados que se han visto en las secciones 4.2.1 y 4.2.2, sirven para controlar los parámetros bajo los que se ejecutan las medidas y minimizar el error de las mismas. Lo mejor es recurrir a diversos sistemas conocidos si lo que queremos es evaluar el comportamiento del polarímetro, sus márgenes de error y la reproducibilidad de las medidas. Existen, además, una serie de sistemas, como los recubrimientos metálicos y los prismas de reflexión total, de creciente interés experimental en medidas con ondas evanescentes, generación de *SPs (Surface plasmons)* [70] y Elipsometría de superficies [38]. Entre los sistemas elegidos se incluirán polarizadores y láminas retardadoras, interfases dieléctricas o metálicas (según lo expuesto en la sección 2.1.3), o un difusor superficial típico como es una superficie lambertiana. De esta forma comprobaremos el funcionamiento del polarímetro en tres configuraciones básicas: Reflexión, transmisión y scattering superficial. Estos tres tipos de patrones servirán para evaluar el funcionamiento de ambas configuraciones polarimétricas (SP y DRCP) en las distintas situaciones que se desglosarán a continuación.

4.3.1. Transmisión

Para valorar el funcionamiento de ambos polarímetros en transmisión se han utilizado un polarizador, una lámina $\lambda/4$ y una lámina $\lambda/2$, además de una serie de medidas en vacío realizadas aparte del proceso de calibrado. La lámina $\lambda/4$ utilizada en la medida es una lámina de orden cero para 633 nm, la misma que se deshechó en la fase de selección de componentes para el dispositivo (entonces llamada Lámina 2). Por su parte, la lámina $\lambda/2$ es una lámina de orden uno para 532 nm fabricada por *Melles* Griot. En la tabla 4.6 se exponen las matrices de Mueller experimentales que se han medido con el SP y el DRCP para cada configuración indicada, con sus correspondientes ajustes teóricos y el error relativo de cada uno de ellos. Todas las matrices de la tabla se muestran normalizadas al valor m_{00} y con tres cifras decimales de precisión, entendiendo que es el orden de magnitud de los errores típicos de calibrado en el DRCP, y que todo valor por debajo de ese límite es ruido de medida, despreciable a todos los efectos.

Se han intentado reproducir varias situaciones con distintos ángulos acimutales (referidos al Polarizador) de los componentes polarimétricos. No obstante, como se puede apreciar en la tabla 4.6, existen desviaciones del comportamiento ideal debidas a errores en el posicionamiento angular de los elementos, menos sofisticado que el de los componentes internos del Polarímetro, así como a la imperfección de los mismos. En la tabla 4.7 se muestran tres matrices de vacío obtenidas en medidas no consecutivas. Se puede comprobar la reproducibilidad las medidas y del procedimiento. Además, la fluctuación del resultado se encuentra fuera de las primeras cifras significativas.

	DRCP	SP	Parámetros DRCP/SP	Teoría	ΔE DRCP/SP
Vacío	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & 0,001 & -0,002 & 0,001 \\ 0,009 & 1,005 & 0,004 & 0,004 \\ 0,002 & -0,001 & 1,004 & -0,004 \\ -0,003 & 0,001 & 0,009 & 1,000 \end{array}\right)$	$ \left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & -0,001 & -0,005 & 0,002 \\ 0,013 & 1,008 & 0,014 & -0,003 \\ -0,002 & 0,102 & 1,012 & 0,001 \\ 0,001 & 0,005 & -0,009 & 1,009 \end{array} \right) $	$\begin{array}{rcl} t_1 = t_2 = & 0.5 \\ \delta = & -0.3/0.4 \\ \psi = & 0.1/-1.1 \end{array}$	$\left(\begin{array}{rrrrr} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$	$1 \cdot 10^{-3} / 1 \cdot 10^{-1}$
Polarizador (0^0)	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & -0,999 & -0,065 & -0,009 \\ -0,998 & 0,997 & 0,064 & 0,012 \\ -0,064 & 0,065 & 0,001 & 0,000 \\ -0,004 & 0,005 & 0,001 & -0,002 \end{array}\right)$	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & -1,001 & -0,199 & 0,004 \\ -1,005 & 0,992 & 0,198 & -0,004 \\ -0,144 & 0,143 & 0,028 & 0,000 \\ 0,007 & -0,007 & -0,001 & 0,000 \end{array}\right)$	$\begin{array}{rrrr} \alpha = & 1.9/7.7 \\ \beta = & 7.7/-0.1 \\ t_1 = & 0/0 \\ t_2 = & 1/1 \end{array}$	$\left(\begin{array}{rrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrrr$	$1 \cdot 10^{-3} / 1 \cdot 10^{-2}$
Polarizador (45 ⁰)	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & 0,078 & -1,010 & -0,021 \\ 0,059 & -0,001 & -0,057 & 0,002 \\ -1,002 & -0,079 & 1,010 & -0,003 \\ -0,002 & 0,002 & 0,010 & 0,000 \end{array}\right)$	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & -0,004 & -1,002 & -0,002\\ -0,007 & 0,000 & 0,005 & 0,001\\ -1,007 & 0,003 & 0,995 & 0,003\\ 0,002 & -0,001 & -0,006 & 0,001 \end{array}\right)$	$\begin{array}{rcl} \alpha = & 47,2/44,9 \\ \beta = & 1,18/-0,12 \\ t_1 = & 0/0 \\ t_2 = & 1/1 \end{array}$	$\left(\begin{array}{rrrrr} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$	$1 \cdot 10^{-2} / 1 \cdot 10^{-2}$
Lámina $\lambda/4~(0^0)$	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & -0,003 & 0,007 & 0,010 \\ 0,015 & 0,995 & 0,051 & -0,049 \\ -0,001 & 0,051 & 0,007 & 0,999 \\ 0,000 & 0,056 & -0,984 & 0,013 \end{array}\right)$	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & 0,005 & 0,002 & -0,009 \\ 0,018 & 1,013 & 0,015 & 0,015 \\ 0,000 & -0,005 & -0,004 & 1,019 \\ 0,003 & -0,008 & -1,002 & -0,013 \end{array}\right)$	$\begin{array}{cccc} \varphi = & 1.4/-0.3 \\ \delta = & 89.5/90.5 \\ \psi = & 0.1/0.3 \\ t_1 = t_2 = & 0.5 \end{array}$	$\left(\begin{array}{rrrrr} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{array}\right)$	$5 \cdot 10^{-3} / 1, 3 \cdot 10^{-2}$
Lámina $\lambda/2 (0^0)$	$ \left(\begin{array}{cccc} 1.000 & 0.001 & 0.008 & 0.002 \\ 0.017 & 0.998 & 0.043 & -0.015 \\ 0.002 & 0.044 & -0.864 & 0.511 \\ 0.004 & 0.012 & -0.507 & -0.855 \end{array} \right) $	$ \left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & -0,005 & 0,009 & -0,006 \\ 0,017 & 1,005 & -0,047 & 0,021 \\ 0,003 & -0,064 & -0,867 & 0,513 \\ 0,003 & -0,025 & -0,497 & -0,873 \end{array} \right) $	$\begin{array}{rrrr} \varphi = & 0.7/-0.7 \\ \delta = & 149.4/149.9 \\ \psi = & -0.1/-0.2 \\ t_1 = t_2 = & 0.5 \end{array}$	$\left(\begin{array}{rrrrr} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0,866 & 0,5 \\ 0 & 0 & -0,5 & -0,866 \end{array}\right)$	$9 \cdot 10^{-3}/1, 9 \cdot 10^{-2}$
Lámina $\lambda/2~(45^0)$	$\left(\begin{array}{ccccc} 1,000 & 0,004 & 0,004 & 0,001\\ -0,012 & -0,853 & -0,115 & -0,502\\ 0,005 & -0,107 & 0,983 & -0,030\\ 0,004 & 0,501 & 0,016 & -0,860 \end{array}\right)$	-	$\begin{array}{lll} \alpha/\beta = & 22.9/18.9 \\ \varphi = & 46.8 \\ \delta = & 149.7 \\ \psi = & -0.3 \\ t_1 = t_2 = & 0.5 \end{array}$	$\left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.866 & 0 & -0.5 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & -0.866 \end{array}\right)$	$9 \cdot 10^{-3}$

Tabla 4.6: Medidas de sistemas ópticos en transmisión

Medida 1				Medida 2					Medida 3				
1	1,000	0,001	-0,001	0,000	(1,000	0,001	-0,002	0,001		(1,000	-0,001	-0,001	-0,001
	0,009	1,003	0,001	0,007	0,009	1,005	0,005	0,004		0,010	1,005	0,002	0,009
	0,001	0,000	1,002	-0,004	0,002	-0,001	1,004	-0,004		0,000	0,001	1,003	-0,003
$ \langle$	-0,003	0,001	0,008	1,000	-0,003	0,001	0,009	1,000 /		-0,002	-0,001	0,006	1,000 /

Tabla 4.7: Medidas en vacío no consecutivas del DRCP.

4.3.2. Reflexión

El siguiente paso para el testeo del dispositivo trata de probar su capacidad de trabajo en medidas de reflexión sobre superficies planas pulidas. En estas superficies los ejes transversales en los que es descrita la polarización son reorientados, algo que puede ser fuente de errores sistemáticos si no se tiene en cuenta. A efectos de comparación, se han simulado las matrices de reflexión para los distintos sistemas utilizando las relaciones de Fresnel (sección 2.1.3). Las matrices de mueller de ambas componentes se pueden calcular haciendo uso de las matrices de Pauli y de las matrices de Jones del sistema (ver ecuación 2.98), que para la reflexión y transmisión en la interfase entre dos medios son:

$$J_R = \begin{pmatrix} \tilde{r}_S & 0\\ 0 & \tilde{r}_P \end{pmatrix}, \quad J_T = \begin{pmatrix} \tilde{t}_S & 0\\ 0 & \tilde{t}_P \end{pmatrix}$$
(4.27)

Los sistemas que se han medido son tres: Un prisma de reflexión total procedente de unos prismáticos sin caracterizar (Prisma 1), un prisma reflexión total (Vidrio BK7) de Melles Griot con recubrimiento antireflejante en una de las caras (Prisma 2), y una lámina plana (slide) de microscopio con una capa de sputtering de Oro de unos 100 nm. El Prisma 2 tiene un índice n = 1,5151 según el catálogo Schott [158], y para el slide recubierto de Oro se ha supuesto un índice n = 0.2 + 3.1i a 633 nm [56]. En primer lugar se muestra, en la fig. 4.14, una comparativa entre los resultados de los dos polarímetros y la predicción teórica para la evolución, en función del ángulo de incidencia, de los parámetros de la matriz de Mueller para la reflexión en la interfase aire-dieléctrico del Prisma 2. Se ha mantenido el valor del parámetro m_{00} , y se han normalizado a este el resto de los parámetros. Las gráficas muestran la gran coincidencia en los resultados de los valores normalizados, sobre todo en el caso del SP. Los resultados obtenidos para el DRCP en el parámetro m_{00} se ajustan perfectamente a los valores teóricos, mientras que existen una serie de pequeñas desviaciones en los parámetros de la caja superior derecha e inferior izquierda de la matriz experimental (idealmente nulos), que convergen hacia el valor teórico a medida que aumenta el ángulo de incidencia. En el caso del SP no se presenta m_{00} ya que el algoritmo utilizado construye un factor de escala arbitrario en cada una de las medidas, normalizando las intensidades recibidas. El resultado, por tanto, no es comparable.



Figura 4.14: Medidas SP y DRCP y simulación de la reflexión en una interfase de Vidrio BK7: Evolución de la matriz de Mueller en función del ángulo de incidencia (θ).



Figura 4.15: Medidas DRCP y simulación de la reflexión en una interfase de Vidrio BaK1: Evolución de la matriz de Mueller en función del ángulo de incidencia (θ).



Figura 4.16: Medidas SP y simulación de la reflexión en una interfase de Oro: Evolución de la matriz de Mueller en función del ángulo de incidencia (θ).

En el caso del Prisma 1, se ha deducido su composición en base al análisis de las medidas experimentales, que muestran que muy probablemente se trata de un Vidrio BaK1 de índice de refracción n = 1,5704 según el catálogo *Schott* [158]. En la fig. 4.15 se muestran los resultados obtenidos mediante el DRCP para el Prisma 1, junto con la simulación de la reflexión en la interfase de Vidrio BaK1. Se aprecia un buen acuerdo entre teoría y medidas experimentales.

Tras el estudio de la interfase de Vidrio y aire se procedió a analizar la interfase aire-metal, para lo cual se utilizó el *slide* con recubrimiento de Oro. Los resultados obtenidos para una medida con el SP (fig. 4.16) muestran la buena descripción experimental que se obtiene del proceso, cuya variación con respecto a los valores teóricos es mínima. En este caso, el SP sí presenta ligeras desviaciones con respecto a la teoría en los parámetros de Mueller nulos. Un posible origen de esta discrepancia puede ser el hecho de que el cálculo se hace para un metal masivo (*bulk*), mientras que el espesor (~ 100 nm) es característico de una capa, presentando una absorción limitada y una pequeña transmitancia (cercana al 1%).



Figura 4.17: Reflexión total en un prisma: Geometría del problema.



Figura 4.18: Medidas DRCP y simulación de la reflexión total en vidro BK7: Evolución de la matriz de Mueller en función del ángulo de incidencia (θ).


Figura 4.19: Medidas DRCP y simulación de la reflexión total en Vidro BaK1: Evolución de la matriz de Mueller en función del ángulo de incidencia (θ).

Para finalizar los resultados relativos a la reflexión en interfases, se ha analizado el problema de la reflexión total en prismas dieléctricos. Los procesos involucrados en este comportamiento son sensiblemente más complicados que en el caso de la reflexión en la interfase Aire-Vidrio, ya que es necesario estudiar en conjunto el comportamiento de tres fenómenos, la transmisión en la primera interfase del prisma (Aire-Vidrio), la reflexión en la segunda interfase (Vidrio-Aire) y la transmisión en la tercera interfase (Vidrio-Aire). En las figs. 4.18 y 4.19 se exponen los resultados obtenidos mediante el DRCP para los prismas de Vidrio BK7 y BaK1, respectivamente, junto con sus respectivos cálculos teóricos. De acuerdo con la geometría experimental esquematizada en la fig. 4.17, la abscisa de estas figuras indica el ángulo de incidencia sobre la primera interfase.

En ambos sets de figuras para la reflexión total se aprecia una muy buena correspondencia entre resultados experimentales y teóricos. Las desviaciones del comportamiento ideal pueden estar relacionadas con el recubrimiento (*coating*) antireflejante de la tercera cara del prisma y con el alineamiento, ya que el eje de giro del prisma está centrado en la segunda cara (2), con lo cual el punto de incidencia en la primera cara (1) y el punto en el que el haz emerge del prisma (3) varían para cada ángulo de incidencia, y es necesario un alineamiento del PSA para cada ángulo de detección.



(b) Ángulo de scattering comprendido entre -45^{0} y -20^{0} .

Figura 4.20: Difusión por una superficie de spectralon medida con DRCP: Evolución de la matriz de Mueller en función del ángulo de scattering (θ). Situación (a): $60^0 \le \theta \le 90^0$. Situación (b): $-45^0 \le \theta \le -20^0$.

4.3.3. Difusión

La configuración de difusión exige grandes variaciones angulares en el sistema de detección, al tiempo que un buen control del ángulo de incidencia. Esta es una prueba representativa de todos los experimentos de scattering superficial o en volumen. Se eligió, al contrario que en los casos anteriores, un par de medios muy despolarizantes. El primero es una placa de *Spectralon* certificado. El Spectralon es uno de los recubrimientos más utilizados para las esferas integradoras, en concreto, este fragmento es el patrón de calibrado de la esfera integradora de un Espectrofotómetro *Perkin-Elmer*. Las medidas han sido realizadas en la región de retrodifusión con incidencia normal sobre la superficie de las muestras, y los ángulos de scattering varían desde -90^{0} hasta $+90^{0}$, siendo 0^{0} la dirección de retrodifusión. Los valores obtenidos en la matriz de Mueller son muy parecidos a los esperados para un despolarizador total (tabla 2.1, pg. 38). En las figs. 4.3.2 y 4.3.2 se muestra la evolución de los parámetros de Mueller para dos medidas no contínuas realizadas con el DRCP. A la vista de los resultados, podemos considerar este difusor como típicamente lambertiano, pues el parámetro m_{00} tiene una evolución proporcional al $cos(\theta)$.

A continuación, se utilizó un fragmento de escayola, cuya capacidad de despolarización está ligada a la aleatoriedad con la que se haya lijado o suavizado su superficie. En este caso se ha utilizado un folio de papel convencional y se ha realizado un movimiento circular para pulir la misma. Los resultados se muestran en la fig. 4.21. La medida presentada está realizada para un ángulo de incidencia de 0^0 y ángulos de difusión comprendidos entre -45^0 y 45^0 , y se incluyen los resultados del DRCP y el SP para su comparación. Se puede apreciar como el comportamiento de los parámetros dista, en ocasiones, del de un despolarizador ideal. Es posible que la forma de pulir la superficie del material dé lugar a un determinado patrón (a pesar de buscar la aleatoriedad) debido al error humano, el cual tenga como consecuencia un valor distinto de 0 en los valores principales de despolarización d_1 , d_2 y d_3 (responsables de los parámetros m_{11} , m_{22} y m_{33} , cuyo valor dista ligeramente de ser nulos). En este caso, basándonos en el parámetro m_{00} , podemos afirmar que el comportamiento de este fragmento de escayola difiere del que puede presentar un difusor lambertiano.



Figura 4.21: Difusión por una superficie de escayola medida con DRCP y SP: Evolución de la matriz de Mueller en función del ángulo de scattering (θ) .

4.4. Elaboración de Muestras

Durante el desarrollo de la tesis se han utilizado distintas muestras sobre las que se han realizado las medidas polarimétricas. Las primeras medidas, realizadas con el scatterómetro primitivo y con el SP, fueron realizadas sobre algunas deposiciones de partículas y fibras sobre substrato, siguiendo el ejemplo de las referencias [159] y [160]. Para hacer los test al dispositivo experimental se utilizaron componentes ópticos polarizantes estándar (como láminas retardadoras y polarizadores), muestras despolarizantes, prismas y espejos. También se han realizado muestras en volumen, como disoluciones de partículas metálicas o dieléctricas, e incluso soluciones de α -glucosa. Finalmente, la necesidad de muestras bien caracterizadas, y de variabilidad sobre una geometría bien definida, nos ha llevado a diseñar y encargar obleas fotolitografiadas de Silicio, capaces, a priori, de poner de manifiesto distintos efectos de interés para esta Tesis.

4.4.1. Procedimiento Manual

Las muestras fabricadas manualmente responden a dos tipos bien diferenciados: Deposiciones de partículas o fibras, metálicas o dieléctricas, sobre sustrato plano y suspensiones en volumen, bien sea de partículas metálicas o dieléctricas, o de α -glucosa. Teniendo en cuenta que, para la fabricación de las muestras planas, es necesario realizar las correspondientes suspensiones en volumen, comenzaremos la exposición del procedimiento de fabricación por estas últimas.

Protocolo de limpieza para el material de laboratorio utilizado: Con objeto de evitar impregnar de grasa los elementos durante la manipulación, se utilizaron guantes de Látex de nueva generación, exentos de polvo y, por tanto, especialmente indicados para no contaminar las muestras. Para la limpieza de las cubetas se utilizó un chorro de agua ultrapura, seguido de un baño de agua ultrapura y acetona (1 : 1 en volumen), tras el cual se volvió a limpiar con un chorro de agua la cubeta que se secó con un chorro de aire filtrado, con una presión de 5 bares. Los portamuestras para la fabricación de muestras planas se lavaron por un procedimiento mucho más agresivo, al igual que los tubos de ensayo donde se almacenan las muestras, ya que los primeros están contaminados con sustancias protectoras para su almacenaje y los segundos pueden presentar trazas de las muestras que han albergado previamente. Para su limpieza es necesario sumergirlos durante un periodo no inferior a 24 horas en un baño de ataque conformado por una disolución al 18% de ácido clorhídrico (HCl suministrado por Sigma-Aldrich en una concentración del 36% en agua). Tras esto son enjuagados con agua para eliminar el ácido y sumergidos en un nuevo baño de jabón capturador (24 horas), que facilita la liberación y decantación de todas aquellas impurezas que todavía puedan presentar tanto portamuestras como tubos de ensayo. Por último, se elimina el exceso de jabón con agua y se les aplica un chorro final con una solución de acetona y agua (1:1 en volumen), tras la que son secados por medio de aire filtrado comprimido.

Muestras en Volumen

Para la elaboración de muestras en volumen fueron utilizadas cubetas de laboratorio de la marca *Hellma*, con una capacidad de 3,5 ml y 10 mm de lado. Dichas cubetas están fabricadas en un Vidrio crown tipo UK5 [158] que posibilita una transmisión superior al 80 % de la luz recibida en incidencia normal, siempre y cuando la longitud de onda esté comprendida entre los 320 nm y los 2500 nm. Las suspensiones son realizadas a partir de muestras estándar comerciales y coloides suministrados por los fabricantes, controlando los volúmenes de partículas utilizados mediante el uso de una micropipeta (fabricada por *Brand GmbH*) que permite una precisión de 1 μ l, y los de agua ultrapura mediante una pipeta con precisión de 1 ml. La mezcla se realiza en tubos de ensayo limpios, que se mantienen ligeramente inclinados en un agitador de vaivén orbital, para evitar la decantación hasta el momento de su uso. Las muestras elaboradas no son conservadas por periodos superiores a 24 horas, para prevenir la formación de agregados.

Existe la posibilidad de introducir sustancias quirales en las muestras en volumen, como la α glucosa, con objeto de realizar medidas en medios turbios que presenten actividad óptica. Para ello se
utiliza una disolución de agua ultrapura y glucosa, a la que se le pueden añadir partículas dieléctricas

para introducir turbidez. Las cantidades exactas de glucosa utilizadas se han medido por medio de una balanza analógica de precisión modelo Atlas. La glucosa anhidra utilizada es suministrada por la casa Sigma-Aldrich, con un 96% de pureza.



Figura 4.22: Difusión de una disolución de partículas de Poliestireno de 3 $\mu{\rm m}$ (0,001 % sólido) en $\alpha\text{-glucosa 1M}.$

Deposiciones en Superficie

Tras la limpieza de los portamuestras suministrados por *Corning* según el protocolo que se ha comentado al inicio de esta sección, el método para fabricar las muestras varía según el tipo de depósito:

• Fibras: La deposición de fibras es ligeramente más complicada que la de partículas. Las fibras de Vidrio con las que se ha trabajado son muestras de diámetro 1 μ m en su sección central. Es necesario colocar la fibra anclada a dos apoyos a nivel, entre los cuales se situará el portamuestras nivelado. Con mucho cuidado (para evitar su rotura) es necesario tensarla suavemente para alinearla sobre el portamuestras. Se eleva el portamuestras hasta que su altura se aproxime lo suficiente a la fibra, y se depositan dos gotas de esmalte (una a cada lado) sobre la fibra, para que quede sujeta al mismo. Tras el secado del esmalte (unos minutos) se vierte una gota de etanol sobre la parte central de la fibra, de forma que la tensión superficial de la gota en el proceso de evaporación adhiera la fibra al substrato. El esquema del dispositivo utilizado para realizar esta operación es el de la fig. 4.23(a), mientras que en la fig. 4.23(b) se presenta una fotografía de una fibra sobre substrato realizada con el microscopio óptico.



(a) Montaje para la deposición de fibras.



(b) Fibra depositada sobre substrato (Microscopio Óptico, $\times 100).$

Figura 4.23: Deposición de fibras sobre substrato: Dispositivo de deposición y muestra fabricada.

• **Partículas**:En primer lugar se elabora una suspensión de las características deseadas, tanto en concentración como tamaño y composición de las partículas. Tras esto se depositan una serie de gotas (aproximadamente 0,03 ml de disolución por cada gota depositada con el cuentagotas) sobre

la superficie del portamuestras de laboratorio de forma homogénea. De esta forma se controla "grosso-modo" la densidad de población de partículas, que en caso necesario se comprueba posteriormente sobre imágenes de microscopía (ver fig. 4.24). Una vez depositadas las gotas de suspensión en el portamuestras, se sitúa en un agitador de vaivén orbital horizontal, para mejorar la homogeneidad de la muestra, cubriendo en la medida de lo posible la muestra, para evitar su ensuciamiento. Tras esto sólo cabe esperar a la evaporación del líquido (agua ultrapura) para obtener una muestra plana de partículas.



Figura 4.24: Fotografía de una muestra de partículas de Poliestireno de 1,1 μ m (Microscopio Óptico, ×100).

Metalizado de las Muestras en Superficie

La necesidad de trabajar con muestras y substratos metálicos hizo que se recurriera a la técnica del *sputtering*, que suele ser usada habitualmente para el recubrimiento de muestras dieléctricas en microscopía electrónica. La máquina utilizada para realizar el proceso es un Metalizador SCD-040 de la casa *Balzers Union*. Para la realización del sputtering es necesario introducir la muestra en una cámara de vacío. Dentro de la cámara existe una placa (electrodo) del material con el que se quiere recubrir la muestra (en nuestro caso Oro), sobre la que se hacen incidir iones acelerados, que forman parte del plasma gaseoso generado mediante la aplicación de un fuerte campo eléctrico (generalmente un plasma de Argón). Los iones acelerados arrancan partículas neutras de la placa (que pueden ser átomos individuales, conjuntos de átomos o moléculas) que no se encuentran en equilibrio termodinámico, y tienden a depositarse sobre las superficies que se encuentran en la cámara de vacío. La muestra situada en la cámara será recubierta por dichas partículas, generando una fina capa controlada por medio del tiempo de exposición y la distancia de operación. El detalle inferior derecho de la fig. 4.6(b), donde se muestran diferentes detalles del montaje experimental, se puede apreciar una oblea recubierta con Oro mediante sputtering sobre la que está incidiendo el láser.

Pese a que las muestras metalizadas no son susceptibles de ser lavadas con baños y chorros de agua, pues esto dañaría el metalizado, se ha tomado la precaución de limpiarlas con aire puro comprimido a 3,5 bares de presión, para eliminar cualquier resto de polvo o suciedad que pudiera presentar la superficie. Tampoco puede esperarse indefinidamente para su uso, ya que una capa tan delgada sufre procesos de degradación.

4.4.2. Muestras Fotolitográficas

La necesidad de unas muestras para la medida experimental cuya geometría y propiedades estuvieran bien definidas hizo que se encargara la fabricación de una serie de patrones de Silicio para la medida en el laboratorio. El proceso de fabricación, llevado a cabo por *Tekniker*, consta de los siguientes pasos:

1. Diseño de la máscara para la aplicación fotolitográfica: De acuerdo a las especificaciones que los fabricantes nos dieron (capacidad de realizar relieves en dirección Z -vertical- de hasta 2 μ m y de resolver detalles de 1 μ m en las direcciones laterales, X e Y) se abordó el diseño, en formato CAD, de una máscara que serviría como patrón (negativo) para la fabricación de

obleas de Silicio. Se estudiaron las distintas geometrías que se podrían construir en la misma, y su distribución espacial para permitir un correcto uso en el laboratorio, que no diera lugar a confusión entre muestras. El esquema final de la máscara resultante positivado, es decir, lo que se apreciará al contemplar la oblea de Silicio, se muestra en la fig. 4.25.



Figura 4.25: Esquema positivado de la máscara fotolitográfica.

Las geometrías principales utilizadas están compuestas por unas estructuras crecidas sobre un substrato, denominadas a lo largo de esta memoria ribs y grooves. Las ribs son elevaciones lineales de sección rectangular (ver fig. 4.26), mientras que las *grooves* son sus respectivos negativos, i.e. hendiduras lineales de sección rectangular. Con el diseño elegido se pretendió dar lugar a un set de elementos (situados sobre un substrato de dimensiones 9×9 mm en el que se presentan 1 ó 2 estructuras longitudinales) que pusieran de manifiesto efectos de interacción y permitieran, a su vez, relacionarlos con los tamaños y distancias entre las estructuras. Para evitar confusiones y permitir tanto la localización como la fabricación de cada uno de los elementos se utilizó el sistema de coordenadas alfanumérico de la fig. 4.25, en el cual todos los elementos de la mitad superior (cuadrantes 1 y 2) se corresponden con ribs y todos los de la mitad inferior con grooves (cuadrantes 3 y 4). Se eligieron dos alturas diferentes para las geometrías, 1 μ m y 2 μ m, por las restricciones propias del proceso de fabricación, y diferentes combinaciones de anchos y distancias entre *ribs* (resp. grooves). Las anchuras elegidas fueron 1, 2, 3 y 4 μ m, mientras que las separaciones (distancia entre centros) van de 2 μ m a 8 μ m. Además de estos elementos, se diseñaron otros (elementos 6B-F y 7B-F, fig. 4.27) formados por una pequeña red de grooves, cuyo tamaño es el mismo pero varía su separación, para estudiar otros efectos, en un principio ajenos a esta memoria.



Figura 4.26: Imagen de dos *ribs* obtenida por microscopía electrónica de barrido (SEM, $\times 6000$).

2. Fabricación de la máscara para la aplicación fotolitográfica: Partiendo de los diseños en CAD realizados, los operarios de Tekniker transformaron el CAD a GDSII, y enviaron los diseños al fabricante de la fotomáscara (*Photronics*) para que la fabricaran en Vidrio cromado. La resolución que consigue el fabricante en su técnica de fabricación es de 180 nm. La máscara puede ser utilizada para la generación de un número indeterminado de obleas de Silicio sin ningún problema.



Figura 4.27: Imagen del elemento 6B-F de una oblea de Silicio (Microscopio Óptico, ×100).

3. Fotolitografiado de la oblea: Consiste en transferir los motivos dibujados en la máscara a la oblea de Silicio. Para ello se recubre la oblea con una resina fotosensible, se coloca la máscara sobre ella y se insola con luz UV. A continuación, se revela la oblea obteniendo 2 zonas bien diferenciadas, según hayan sido o no tapadas por la máscara:

Zonas expuestas a la radiación UV: Tras el proceso de revelado el Silicio queda a la vista.

 $Zonas \ solapadas \ a \ la \ radiación \ UV$: Siguen protegidas por la resina, que cumplirá la función de proteger el Silicio.

- 4. Ataque del Silicio en equipo RIE (Reactive Ion Etching): Se ataca el Silicio en el equipo DRIE hasta la altura especificada. En este caso se realizaron ataques en las distintas obleas de 1 μ m y 2 μ m. Para ello se emplean los gases SF_6 y C_4F_8 de forma simultánea. La tasa de ataque ronda los 900 nm/min en la zona central de la oblea. La altura de las geometrías es el único parámetro común para todos los elementos dentro de una misma oblea de Silicio, pues depende directamente de la exposición al RIE a la que se someta la muestra. De acuerdo con esto, en adelante me referiré a la altura de las geometrías como altura de las obleas, o simplemente altura, aunque no sea una acepción precisa. Este es uno de los principales problemas de este tipo de muestras, pues el ataque para las alturas de 2 μ m causa muchos problemas en la resolución de las geometrías (*ribs* o grooves), ya que no es del todo uniforme, en contra de lo que aseguraba el fabricante (ver figs. 4.28(a), 4.28(b) y 4.28(c) con los defectos de tres elementos elegidos al azar). El ataque para las alturas de 1 μ m es algo mejor, pero sigue presentando ligeras imperfecciones y una manifiesta falta de uniformidad, como se muestra en la fig. 4.28(d), en la que aparecen zonas sombreadas dentro de una misma groove debidas a defectos de enfoque en el microscopio óptico utilizado, causados a su vez por la variación en la profundidad del perfil de la groove.
- 5. Corte de la oblea: Corte de las obleas en 4 cuadrantes con una cortadora de Silicio, para facilitar su manipulación y evitar la contaminación de las muestras sin usar, tal y como se representa en la fig. 4.25.
- 6. Metalizado de las muestras: Algunas de las muestras que ya se habían analizado fueron recubiertas con una capa de unos 50 nm de Oro, con objeto de estudiar las propiedades de las mismas geometrías en para composiciones distintas, por un lado un dieléctrico (Silicio) y por otro un metal (Oro).



(a) Elemento 2F. Oblea de silicio de 2 $\mu {\rm m}$



(c) Elemento 4D. Oblea de Silicio de 2 $\mu \mathrm{m}$



(b) Elemento 4F. Oblea de Silicio de 2 $\mu {\rm m}$

Length: 1,04 µm ⊣

(d) Elemento 11F. Oblea de Silicio de 1 $\mu {\rm m}$



Pese al aparente orden existente en esta exposición, los defectos en las muestras debidos al proceso de fabricación no fueron conocidos hasta que se analizaron las medidas experimentales. Tras observar la aparición de asimetrías angulares en los valores experimentales y verificar que no se trataba de un problema de adquisición o tratamiento de datos, se optó por analizar las obleas (hasta ese momento guardadas, a excepción del cuadrante con el que se realizaban las medidas, para evitar su contaminación). Para ello se examinaron todos los elementos susceptibles de ser medidos en el laboratorio mediante dos microscopios ópticos, ambos equipados con sensores CCD para la captura de imágenes en tiempo real. El primero de ellos (utilizado, por ejemplo, para las figs. 4.28(a), 4.28(b) y 4.28(c), es un microscopio Nikon modelo Eclipse ME600 con un rango de 5 a 100 aumentos, sobre el que se encuentra instalada una cámara CCD modelo U-eye. El segundo (usado en el caso 4.28(d)) se trata de un microscópio óptico de la casa Olympus modelo BX51 con cámara incorporada y rango de trabajo similar al anterior, pero con una mayor resolución en el sensor CCD. Tras este análisis se pudieron apreciar una serie de imperfecciones en las muestras que se acentuaba con la profundidad del ataque químico. Existe una clara asimetría en el ataque, que se pone de manifiesto en las figs. 4.28(a), 4.28(b) y 4.28(c), y que consiste en la aparición de un borde más oscuro en la zona izquierda de la geometría, y un borde más claro en la derecha. Es decir, los bordes izquierdos de las *ribs* presentan un halo algo más ancho y oscuro que los derechos. Suponemos que esto se mantendrá, aunque a menor escala, en las geometrías de 1 μ m de altura, poniendo de manifiesto una preferencia del ataque por uno de los lados de los elementos. En los elementos con dos geometrías (fig. 4.28(c)) la resolución del gap intermedio es bastante deficiente, y frecuentemente aparecen una especie de surcos que comunican ambas geometrías. Asimismo, en la fig. 4.29 se aprecia claramente una asimetría radial en la muestra, debida a la falta de uniformidad característica de la aplicación RIE. Por otro lado, como ya se comentó anteriormente, el ataque en un mismo elemento no es del todo uniforme, y se presentan variaciones tanto



Figura 4.29: Perfilometría del ataque en una oblea medida con un perfilómetro de contacto.

en el ancho (fig. 4.28(a)) como en la profundidad (diferente luminosidad a lo largo de la geometría en la fig. 4.28(d)). Todo esto, unido al fondo de despolarización introducida por el sustrato, la rugosidad debida al sputtering de Oro en las muestras metalizadas [159] y la complejidad manifiesta del modelo geométrico de las *ribs* o las *grooves*, a la que se hará mención en el próximo capítulo, ha hecho que unas muestras supuestamente fabricadas bajo unas condiciones ideales y con un error de dimensiones ínfimo (siempre a juicio del fabricante) se hayan convertido en un sistema complejo y pobremente caracterizado, planteando más dificultades de las que pretendía resolver. Como resultado, se pondrá de manifiesto la precisión y capacidad del método polarimétrico y del PD utilizados, sin los cuales no se hubiera podido llegar a las conclusiones acerca de las peculiaridades de la geometría elegida.



Figura 4.30: Defecto de fabricación en el elemento 5C, correspondiente a una oblea de Silicio 2 μ m de altura (Microscopio Óptico, ×100).

Todos los defectos de las muestras juegan un papel muy importante en las propiedades de scattering de las mismas, pues cada uno de ellos introduce alguna modificación en los patrones de difusión de los distintos elementos de la matriz de Mueller. El área de actuación del láser (ligeramente inferior a 1 mm²) genera una especie de media estadística de todos estos efectos, como si se estuviera promediando una medida en varias geometrías distintas, pero que a la vez interactúan entre sí. Es decir, los defectos en la uniformidad del ataque hacen que las *ribs* (o grooves) presenten distinta anchura y altura dentro del área de impacto del láser, a la vez que aparece una asimetría en el perfil de la oblea y actúan los diversos surcos que ligan unas *ribs* con otras, como si una *rib* de tamaño superior estuviera siendo analizada en determinadas secciones del área de trabajo del láser. Lo que al final se obtendrá será, como es lógico, un cúmulo de todos estos efectos (a los que hay que sumar el sputtering en las muestras recubiertas de Oro) que complicará el análisis de los sistemas en el transcurso del próximo capítulo. Por último, a modo de curiosidad, comentaremos uno de los variados casos de defectos irresolubles al realizar las medidas. En la fig. 4.30 se observa claramente un notable defecto de fabricación, que pudo ser apreciado justo antes de comenzar una medida. La fig. 4.31 muestra sendas imágenes SEM de dos *ribs* de altura $h = 2 \mu m$, fig. 4.31(a), y dos grooves de $h = 1 \mu m$, fig. 4.31(b).

Para evitar contaminación en las obleas de Silicio antes de la medida o antes de realizar el metalizado de las mismas, se llevó a cabo un procedimiento de limpieza aconsejado por el fabricante. Tal procedimiento consta de cuatro pasos, tras los cuales la muestra es almacenada en compartimentos Petri con tapa:

- 1. Se limpia la muestra con un chorro de agua ultrapura, para eliminar el grueso de la contaminación.
- 2. Se sumerge durante un periodo de 24 horas en un baño de limpieza, compuesto por agua, acetona y etanol, con proporciones 4 : 3 : 3 en volumen.
- 3. Se eliminan los restos del baño con un chorro de agua ultrapura.
- 4. Se sopla la muestra por medio de aire filtrado comprimido con una presión de 5 bares.

Todo contacto con la muestra, al igual que en el procedimiento de fabricación manual, se ha realizado usando guantes de Látex exentos de polvo, para evitar la contaminación de la misma, en la medida de lo posible.



(a) Dos ribs de altura $h = 2 \ \mu m$



(b) Dos grooves de altura $h = 1 \ \mu m$

Figura 4.31: Imagenes de pares de estructuras obtenida por microscopía electrónica (SEM, ×3000).

Capítulo 5

Resultados Experimentales en Sistemas Estructurados

En este capítulo pondremos a prueba, sobre sistemas reales, los dos elementos de la metodología que hemos propuesto:

- a) Un dispositivo experimental de alta versatilidad y precisión, capaz de hacer estimaciones de magnitudes polarimétricas (Polarímetro de Compensador Dual Rotatorio, o DRCP).
- b) Una potente herramienta matemática que simplifica enormemente el análisis e interpretación de los resultados (el método de Descomposición Polar, ó PD).

Se expondrán los resultados obtenidos en el transcurso de esta investigación sobre las obleas fotolitografiadas que contienen, como se explicó en el capítulo 4, estructuras de perfil cuadrado, ribs o grooves. La nomenclatura utilizada durante la exposición de resultados es la siguiente: $h \times w - d \mu m$ para hacer referencia a una geometría (bien sea rib o groove) cuya altura es h, su ancho es w y la distancia entre centros de los elementos es d (micras). La ausencia de la magnitud d implica que la geometría es monocomponente. La incidencia del haz láser sobre la muestra se realiza con un ángulo de $0,5^{0}$, para evitar los molestos reflejos y la contaminación que introducen en la señal que recibe el detector, pero a efectos prácticos se considerará incidencia normal.

En primer lugar, en el apartado 5.1, se analizarán los resultados correspondientes a las *ribs* de altura 2 μ m, todas ellas medidas con el polarímetro de Stokes (SP). De igual modo se expondrán los resultados relativos a las medidas de geometrías tipo *rib*, de altura 1 μ m, realizadas con el polarímetro DRCP. La comparación de los resultados obtenidos mediante ambos polarímetros en el capítulo anterior justifica la decisión de no repetir con otro método las medidas sobre muestras de altura 2 μ m. A continuación, en la sección 5.2, se estudiarán las muestras tipo *groove*, comparando los resultados obtenidos mediante el DRCP con las geometrías de características semejantes tipo *rib*. Con objeto de facilitar, en la medida de lo posible, el análisis de los resultados, he decidido representar la evolución de los parámetros m_{ij} mediante gráficas de puntos para las medidas realizadas con el SP, mientras que la misma evolución para las medidas del DRCP se representará con gráficas de línea. La evolución de los parámetros resultantes del PD se expone mediante gráficas de puntos en ambos casos, y siempre acompañan a las de los parámetros m_{ij} . Resulta muy interesante el estudio realizado sobre la asimetría manifiesta de la oblea en el apartado 5.3. Dicha asimetría se traduce en una variación en los patrones de scattering de los distintos parámetros analizados a ambos lados de la región de backscattering.

Los resultados de las medidas y la aplicación del PD han dado lugar a un gran número de gráficos, en los que se podrá apreciar la evolución de los distintos parámetros en función del ángulo de scattering. Estos gráficos son imprescindibles en el análisis de los resultados. No obstante, su extensión compromete la fluidez de la exposición, por lo que he preferido mantener tan sólo una muestra de ellos dentro de este capítulo. El resto de medidas realizadas serán presentadas de forma gráfica en el apéndice B, siguiendo el mismo orden que se utilizará en este capítulo.



Figura 5.1: Parámetros de despolarización para una $rib \ 1 \times 3$ de Si.



Figura 5.2: Parámetros de despolarización para una rib 1 × 4 de Si.



Figura 5.3: Parámetros de despolarización para una groove 1×3 de Si.



Figura 5.4: Parámetros de despolarización para una groove 1×4 de Si.

Las simetrías existentes en los sistemas difusores, como ya se comentó brevemente en las secciones 2.3.3 y 3.2.1, dan lugar a la reducción de grados de libertad en sus matrices de Mueller. En particular, si el sistema es macroscópicamente isótropo, presenta simetría especular con respecto al plano de scattering [5, 39], y no presenta ningún tipo de variación de su posición en el tiempo (sistemas estáticos), su matriz de Mueller queda reducida a una matriz por cajas con 4 elementos independientes $(m_{00} = m_{11}, m_{01} = m_{10}, m_{22} = m_{33} \text{ y } m_{32} = -m_{23})$, siendo el resto de elementos nulos (ec. 5.1) [5]. Cualquier variación del sistema con respecto a este comportamiento puede ser debida a imprecisiones en el alineamiento o a faltas de simetría (debidas a defectos de la geometría del sistema o a su rugosidad superficial [20]).

$$M = \begin{pmatrix} m_{00} & m_{01} & & \\ m_{01} & m_{00} & & \\ & m_{22} & m_{23} \\ & 0_{2\times 2} & & -m_{23} & m_{22} \end{pmatrix}$$
(5.1)

Aunque en el apartado 5.3 se realizará un estudio completo de la simetría de la oblea, conviene adelantar que existe, en correspondencia con la teoría, una simetría por cajas en los parámetros de la matriz de Mueller de acuerdo a lo expuesto en el párrafo anterior, aunque haya variaciones debidas a los defectos de construcción de las estructuras. También adelanto aquí que existe otro tipo de simetría, inherente al sistema, en los patrones de los elementos a ambos lados de la dirección de backscattering. Esta simetría angular también se observa en los resultados, y se incluye en el apartado 5.3, relativo a la simetría.

En adelante, los resultados obtenidos por medio del PD en estructuras tipo *rib* y groove mostrarán cómo las propiedades de las matrices de Mueller de estos sistemas vienen determinadas por la transmitancia total del sistema (m_{00}) , las transmitancias de los estados propios del diatenuador, que cumplen la relación $t = t_1 = 1 - t_2$, el desfase entre estados propios del retardador δ , y los parámetros principales de despolarización d_i . Como es lógico, y ya se adelantó en la sección 3.2.1, si la matriz de Mueller es como la representada en la ec. 5.1, el parámetro t_1 evolucionará de acuerdo al elemento m_{01} de la matriz (asociado al grado de polarización lineal, P_L), mientras que el retardo δ estará ligado a los elementos m_{22} y m_{23} . No obstante, las matrices analizadas no son puras, debido tanto a la integración de estados de polarización causada por la ventana de observación como a la falta de contraste en los mínimos de intensidad, con lo cual es necesario extraer la información de la despolarización del sistema $(d_i$ y, en menor medida, a_i y z_i), para poder analizar de forma realista el comportamiento del resto de parámetros independientes del sistema.

Al aplicar el PD en los distintos sistemas de *ribs* o grooves analizados, se ha podido comprobar cómo, por norma general, aparecen efectos de despolarización. No obstante, de todos los parámetros involucrados en la matriz M_{Δ} , los parámetros principales de despolarización $(d_1, d_2 \ge d_3)$ son los que aparentan contener la información más importante acerca del comportamiento del sistema. En las figs. 5.1 y 5.2, para el caso de *ribs*, y 5.3 y 5.4, para el de grooves, se muestran los parámetros de despolarización para cuatro sistemas monocomponente de Silicio $(h = 1 \ \mu m; w = 3 \ge 4 \ \mu m)$. Todo parece indicar que, a pesar de que los parámetros de polarizancia (z_i) no siempre son despreciables, el grueso de la información sobre la despolarización está en los parámetros principales de despolarización, incluso en aquellas muestras en las que $z_i \simeq 0$ en todos los ángulos de difusión. Es por esto que, en adelante, el análisis de los resultados se llevará a cabo utilizando los parámetros d_i de la matriz M_{Δ} .

En el caso de las medidas realizadas con el DRCP, es suficiente el estudio de los cuadrantes 1^0 y 3^0 , que contienen tres ejemplos para observar la variación con el ancho, y otros cinco para analizar la variación con la distancia entre componentes, todos ellos por duplicado (*rib* o groove). De este modo, los cuadrantes 2^0 y 4^0 ofrecen una casuística algo redundante con la anterior. Por otro lado, en el caso del polarímetro SP no se realizaron medidas sobre grooves, centrando el estudio en la variación de los parámetros para las muestras de los cuadrantes 1^0 y 2^0 de la oblea, que abarcan todas las combinaciones posibles de *ribs* con $h = 2 \mu m$.

Una parte de los resultados aquí dispuestos son de gran actualidad, en el sentido de que la técnica es similar a otras utilizadas en experimentos recientes [132, 134, 135]. Se trata de experimentos en medios densos y sustancias quirales, que son de gran interés en biología y medicina ya que pueden servir para analizar "*in-vivo*" tejidos infartados o tumorales [35].

Por otro lado, la caracterización polarimétrica de componentes ópticos está siendo, cada vez más, un objetivo tecnológico de la polarimetría actual [161, 162]. La eficiencia de los dispositivos de laboratorio está ligada a la calidad de los componentes con los que se construyen [156], como ya se pudo demostrar en la sección 4.1. Los fabricantes y distribuidores deben exigirse cada vez más precisión, homogeneidad y control en los procesos de elaboración de los componentes. Las medidas y pruebas realizadas en el capítulo 4 serán complementadas con una serie de resultados en este capítulo (sección 5.8), que demostrarán cómo el DRCP unido al PD es una herramienta ideal para la caracterización de elementos ópticos y polarimétricos.

5.1. Estructuras tipo "Rib"

Estas estructuras (recordamos su geometría en la fig. 5.5) estaban ubicadas en los cuadrantes 1 y 2 (mitad superior de la oblea, fig. 4.25, pg. 94). En el caso del polarímetro SP se midieron todas las geometrías fotolitografiadas, mientras que en el caso del DRCP únicamente se midieron, dentro de las geometrías del primer cuadrante, aquellas estructuras con una *rib* y con dos *ribs* de $w = 3 \mu m$. Con esto, se han medido muestras monocomponente de distintos tamaños, y pares del mismo tamaño situados a varias distancias.



Figura 5.5: Perfil de dos *ribs*: Magnitudes de la Muestra $(h \times w - d)$.

5.1.1. Ribs de Silicio: Variación con el Tamaño

El problema inverso para el scattering de partículas esféricas o cilíndricas sobre sustratos (para las cuales el principal parámetro es el radio de su sección transversal, R) ha sido estudiado y resuelto con éxito [76]. Sin embargo, para elementos lineales de sección rectangular existen dos parámetros principales, altura h y anchura w, que deben ser controlados. El hecho de que para una geometría esférica ambos parámetros (h y w) estén ligados y su variación se resuma en los cambios que sufra R, hace que su resolución sea más sencilla. En nuestro caso se hace necesario analizar no sólo las medidas experimentales, sino también el comportamiento teórico del patrón de difusión en incidencia normal, cuando se varía alguna de las dos dimensiones. Por medio de simulaciones realizadas con el Teorema de Extinción (sección 2.2.2, pg. 23) y el FDTD (pg. 25), se han obtenido numéricamente los valores del parámetro m_{00} (transmitancia total del sistema). Este cálculo ha sido realizado para un conjunto de sistemas de una *rib* de Au, en los cuales se ha variado h y w suavemente en torno a un valor central. Los resultados, fig. 5.6, muestran fuertes cambios en la distribución angular de m_{00} para pequeñas variaciones en h, con desplazamientos o incluso desaparición de algunos mínimos. Para variaciones del mismo orden en w, los cambios existen pero son mucho menos acusados.

Estos cambios en los patrones de difusión son indicadores del alto grado de dependencia con el tamaño de la geometría, incluso para el caso teórico de un perfil rectangular perfecto. Este perfil teórico no es el que se espera para las muestras experimentales, debido al proceso de fabricación y a la metalización por sputtering. Más aún, para poder reproducir con cierta verosimilitud los resultados experimentales, los cálculos teóricos deben ser redimensionados. Esto constituiría, en sí mismo, un procedimiento de ajuste para simular la geometría del objeto y, por tanto, para el análisis del problema



Figura 5.6: Patrones de difusión del parámetro m_{00} calculados mediante ET para una *rib* de Au: a) variación con la altura h, b) variación con la anchura w.

inverso. Sin embargo, la dificultad de estas simulaciones reside en el hecho de que el perfil de la muestra real puede ser causante de pequeñas desviaciones en la posición de los máximos. Este perfil, de acuerdo a lo expuesto en la sección 4.4.2 (pg. 93), puede llegar a presentar una pendiente mayor de 0,05 μ m/mm (para un ancho de haz aproximado de 1 mm en la muestra). Además, como se aprecia en la fig. 4.26 (pg. 94), el suavizado que presentan las aristas de *ribs* y *grooves*, y los defectos de fabricación en la muestra, contribuyen a diferenciar el comportamiento experimental y el teórico.

Seguidamente se expondrá la dependencia angular de los elementos de la matriz de Mueller para aquellas geometrías con una *rib* ($h = 2 \ \mu m$ y $w \in [1, 4] \ \mu m$), medidas con el SP, acompañados de los principales elementos resultantes de la aplicación del PD (aquellos que presentan variaciones significativas).

Figura 5.7 ($w = 1 \ \mu m$): El parámetro m_{00} presenta una evolución que no es exactamente la esperada en un sistema difusor de sección cuadrada (véase fig. 4.28(a), pg. 96). Los parámetros m_{ij} muestran información poco concluyente, salvo la asimetría de la muestra respecto del plano de scattering (que se aprecia claramente en los parámetros de las cajas superior derecha e inferior izquierda de la fig. 5.7(a)). Los defectos de fabricación parecen ser más severos para las muestras más alejadas del centro de la oblea, como es el caso. No obstante, la aplicación del PD ayuda a la interpretación de este tipo de resultados. Como se irá apreciando en el transcurso de este capítulo, las pendientes abruptas en el parámetro δ (desfase entre estados propios del retardador), se corresponden con valores máximos de diatenuación, es decir, máximos de transmitancia en uno de los estados propios, t_i , y mínimos en el otro, t_j con $j \neq i$. Esta observación puede apreciarse en todas las figuras que se expondrán en los resultados relativos a las obleas fotolitografiadas ya que, cuando el sistema se comporta como un polarizador ideal, la fase entre componentes es indeterminada (descomposición polar de matrices singulares, pg. 46). Un estudio conjunto de los valores de t_1 y δ apunta la situación de dos mínimos de transmitancia para una de las componentes en torno a 70° y a 45°. La transmitancia t_1 presenta los dos mínimos en el lado izquierdo ($\theta < 0$) y, pese a que en el derecho ($\theta > 0$) no están bien definidos, δ mantiene una estructura semejante en ambos lados, indicador inequívoco de la presencia de los mínimos. El hecho de que estos valores estén exentos de despolarización, hace que su comportamiento se pueda interpretar sin dudar de su evolución. La asimetría en d_i , al igual que la presente en t_1 , también revela una fuerte asimetría respecto del propio eje de la *rib*.



Figura 5.7: Difusión (medida con el SP) por una *rib* de Si $(2 \times 1 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .



Figura 5.8: Difusión (medida con el SP) por una *rib* de Si $(2 \times 4 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .

La mayor anchura de las estructuras tipo rib de las figs. 5.9 y 5.8 (w = 3 y 4 μ m, respectivamente) mejora de forma notable la visibilidad de máximos y mínimos del patrón de scattering, debido a la mayor sección eficaz del difusor, mejor relación de forma del elemento y menor peso relativo de los defectos. En estas muestras monocomponente, los máximos y mínimos responden a una estructura difraccional de anchura w [163, 159, 164], en la que no aparecen fenómenos de interacción múltiple. En el análisis del PD se puede apreciar la aparición de trazas de despolarización asociadas a los mínimos del patrón de scattering del elemento m_{00} . La disminución de la cantidad de luz que recibe el detector debida a estos mínimos provoca dos fenómenos relevantes: La aparición de despolarización (debido al fondo despolarizante del sustrato) y la presencia de un máximo en la transmitancia de uno de los estados propios del diatenuador (complementado con un mínimo en el otro), que conlleva un aumento en el grado de polarización lineal. Un mínimo pronunciado en el patrón de scattering de la intensidad de una de las componentes ortogonales (onda S ó P), acompañado de un valor mayor, que no necesariamente debe ser máximo, en la otra (respectivamente, onda P ó S) da lugar a este aumento en el grado de polarización lineal.

Resulta útil pensar que, al observar la difusión del substrato en estos mínimos angulares, lo que realmente se está observando es el efecto del *speckle* producido por el sustrato, con más importancia relativa cuanto más baja sea la intensidad difundida por la *rib* para un ángulo de scattering determinado. El *speckle* mantiene un alto grado de polarización (luz totalmente polarizada en cada "*grano*"), pero al aumentar la ventana de observación comenzamos a integrar estados de polarización, este proceso incoherente introduce la despolarización. Si la ventana de observación fuera puntual, la resolución nos permitiría ver uno a uno los puntos de *speckle*, los cuales conservan en todo momento, para sistemas no dinámicos, la polarización. La pérdida de contraste a medida que nos alejamos de la dirección de retrodifusión y la integración en la observación introducen despolarización, que disminuye a medida que la detección se acerca a la normal [165]. De modo que, en general, la despolarización que aparece en los mínimos de intensidad tiende a ser mayor a medida que el ángulo de scattering en el que se sitúan estos mínimos se acerca a la rasante. En las figs. 5.9(d) y 5.8(d) se aprecia claramente esta situación, que se irá haciendo patente según vayan mostrando el resto de resultados relativos a las obleas fotolitografiadas.

Como ya se comentó anteriormente, otro aspecto importante es la asimetría que manifiestan los parámetros m_{ij} a ambos lados de la normal, y que lógicamente se traslada a los parámetros resultantes del PD. Esta asimetría se puede apreciar mejor en los pares de estructuras y cuanto más ancha es la geometría, y sobre ella se llevará a cabo un estudio detallado más adelante (sección 5.3).

A continuación se muestra (fig. 5.10) el resultado obtenido para una *rib* de Si ($h = 1 \ \mu \text{m}$ y $w = 3 \ \mu \text{m}$) mediante el DRCP. Los resultados obtenidos al realizar las medidas con el DRCP son semejantes, desde un punto de vista cualitativo, a los obtenidos vía SP, salvo por la precisión de la medida DRCP, sustancialmente mejor. La razón de incluir aquí este resultado es facilitar la comparación de la *rib* ($h = 2 \ \mu \text{m}$ y $w = 3 \ \mu \text{m}$) con su homóloga de menor altura ($h = 1 \ \mu \text{m}$ y $w = 3 \ \mu \text{m}$). Los resultados relativos a las *ribs* de Si con $h = 1 \ \mu \text{m}$ y $w = 1 \ y \ 4 \ \mu \text{m}$, se encuentran en las figs. B.1 y B.2 del apéndice B, pg. 106. Es interesante recordar aquí que los defectos de fabricación en las obleas de altura $h = 1 \ \mu \text{m}$ son significativamente menores que en las obleas de $h = 2 \ \mu \text{m}$.

Comparando los resultados obtenidos para *ribs* con alturas de 1 (medidas con el DRCP) y 2 μ m (medidas con el SP), podemos observar cómo, en las muestras de $h = 2 \mu$ m, el contraste entre mínimos y máximos de los distintos elementos de la matriz de Mueller es sensiblemente menor que en el caso de las muestras con $h = 1 \mu$ m. Esto coincide plenamente con lo expuesto en el párrafo anterior. Además, esta mala resolución en la visibilidad y el contraste de las muestras de $h = 2 \mu$ m se traduce en una baja sensibilidad de los parámetros t_1 y δ , cuyo perfil se suaviza a pesar de que la contribución de la despolarización es comparable o inferior al del caso con $h = 1 \mu$ m.



Figura 5.9: Difusión (medida con el SP) por una *rib* de Si $(2 \times 3 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .



Figura 5.10: Difusión (medida con el DRCP) por una *rib* de Si $(1 \times 3 \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .

5.1.2. Ribs de Silicio: Variación con la Distancia

En este apartado se muestran algunos de los resultados obtenidos para geometrías tipo *rib* de dos componentes ($d \in [4,8] \ \mu m$), acompañados de los resultados de la aplicación del PD. Al igual que en el caso monocomponente, los parámetros que muestran variación son m_{00} , t_1 , δ y los parámetros principales de despolarización d_i . Lógicamente, los efectos de interferencia y la interacción entre *ribs* se ponen de manifiesto aumentando el número de lóbulos en el patrón de difusión. Para tener una visión general de este comportamiento se han seleccionado las figs. 5.11 y 5.12, correspondientes con dos pares de *ribs* de Si medidos con el DRCP, de tamaño $1 \times 3 \ \mu m$ y d = 4 y 7 μm , respectivamente.

En el apéndice B se muestran los gráficos que hacen referencia a medidas realizadas con el SP sobre pares de *ribs* de Si de $2 \times 3 \mu m$ (figs. B.3, B.4, B.5, B.6 y B.7). En ese mismo apéndice, los gráficos B.8, B.9 y B.10, presentan el análisis sobre medidas del DRCP, en distintos pares de *ribs* de Si de $1 \times 3 \mu m$.

Tanto en este apartado como en el anterior y, en general, en aquellos en los que trate las muestras fotolitografiadas, resulta interesante analizar el comportamiento del desfase, δ . Si bien está ligado a los parámetros m_{22} y m_{23} , su evolución es mucho más clara que la de dichos parámetros, básicamente debido a la extracción de la despolarización remanente. La figura descrita por el desfase, es característica del tipo de estructura, y más adelante veremos que resulta de gran interés para discriminar entre estructuras *rib* o groove.

Las figs. 5.11 y 5.12 no presentan demasiados cambios con respecto a las precedentes. No obstante, se pueden realizar una serie de observaciones:

- Se aprecia una mayor lobulación en la transmitancia total del sistema, m_{00} , con respecto a la figura de la geometría monocomponente (5.10).
- Ese aumento de la lobulación se traduce en la aparición de máximos y mínimos más abruptos en el parámetro t_1 .
- Es importante apreciar que, pese a la mayor lobulación en m_{00} de la fig. 5.12, la transmitancia t_1 no presenta un mayor número de máximos y mínimos, con respecto a la fig. 5.11.
- El desfase δ mantiene su estructura en la región próxima a retrodifusión, mientras que a partir de $\pm 50^{0}$ varía sensiblemente su comportamiento, posiblemente debido a efectos de sombreado [76].
- Los parámetros principales de despolarización d_i presentan un comportamiento similar en todos los casos.



Figura 5.11: Difusión (medida con el DRCP) por dos *ribs* de Si $(1 \times 3 - 4 \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ).



Figura 5.12: Difusión (medida con el DRCP) por dos *ribs* de Si $(1 \times 3 - 7 \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .

5.1.3. Ribs de Oro: Variación con el Tamaño

A continuación, se muestran resultados similares a los del apartado 5.1.1, pero para muestras metalizadas mediante un sputtering de Au de unos 50 nm de espesor sobre la oblea de Si. Conviene llamar la atención sobre el comportamiento de los parámetros de despolarización en las muestras metalizadas, que merecerá un análisis particular en un apartado más adelante.

Las figs. 5.13, 5.15 y 5.14 hacen referencia a los resultados obtenidos al medir con el SP la difusión de *ribs* de Au de altura constante, con dimensiones 2×1 , 2×3 y $2 \times 4 \mu$ m, mientras que la fig. 5.16 se corresponde con el análisis de una medida con el DRCP sobre una *rib* de Au de $1 \times 3 \mu$ m. Los resultados relativos a las *ribs* de Au con $h = 1 \mu$ m y w = 1 y 4μ m, se encuentran en las figs. B.11 y B.12, del apéndice B, pg. 171.

Si comparamos la fig. 5.7, del apartado anterior, con la 5.13, podemos apreciar cómo el parámetro m_{00} aparece claramente más lobulado en el caso metálico. Asimismo, m_{11} es mucho más constante y la matriz, en general, presenta asimetrías angulares menos notables. En cuanto a los parámetros del PD, en la fig. 5.13 se aprecian mínimos muy claros en los parámetros d_i (ángulos de fuerte despolarización) y un cambio en δ para $|\theta| > 70^0$.

De igual modo, comparando las figs. 5.9 y 5.8 con las homólogas 5.15 y 5.14, se pueden apreciar ligeras diferencias en la lobulación de m_{00} , mientras que la transmitancia, t_1 , mantiene un comportamiento semejante. Se observa cómo aumenta la despolarización en las muestras metálicas, con valores menores en los parámetros d_i . Los desfases, δ , presentan un suavizado en las discontinuidades para las muestras de Au, y diferencias evidentes en la zona rasante. Finalmente, la observación de las figs. 5.10 y 5.16 no introduce nueva información, corroborando las diferencias existentes en la despolarización para muestras metálicas 5.16(d) y dieléctricas 5.10(d).

Al igual que en el apartado anterior, podemos cotejar las figs. 5.15 y 5.16, comparando ribs homólogas de distinta altura (h = 2 y h = 1 μ m, respectivamente). Se aprecia un ligero aumento en la lobulación de m_{00} para la muestra con h = 2 μ m que se traduce en la aparición de nuevos máximos en t_1 . También aumentan los cambios de pendiente en el patrón de δ para esta muestra que, por otro lado, ve considerablemente suavizados los saltos abruptos presentes en la de menor tamaño (h = 1 μ m). Por último, conviene indicar que la despolarización (parámetros d_i) es ligeramente mayor en el caso de h = 1 μ m.



Figura 5.13: Difusión (medida con el SP) por una *rib* de Au $(2 \times 1 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .



Figura 5.14: Difusión (medida con el SP) por una *rib* de Au $(2 \times 4 \ \mu m)$: Evolución de la matriz de Mueller y los parámetros PD en función del ángulo de scattering (θ) .