

UNIVERSIDAD DE COSTA RICA

SISTEMA DE ESTUDIOS DE POSGRADO

CALCULO DE CAMPOS ELECTRODINAMICOS EN LAS  
VECINDADES DE ESFEROIDES METALICOS

Tesis sometida a la consideración de la Comisión del Programa de Estudios de Posgrado en Física para optar al grado de Magister Scientiae.

WILLIAM VARGAS CASTRO

Ciudad Universitaria "Rodrigo Facio" Costa Rica

1990

A mis padres: Buenaventura Vargas y Olga Castro,  
a mis hermanos : Gerardo, Lineth, Adrián, Dunia  
Randall y Roberto;

y a Shirley.

## AGRADECIMIENTOS

A la Universidad de Costa Rica por el apoyo brindado desde el momento en que inicié mis estudios en el Centro Universitario del Atlántico y luego en la Escuela de Física.

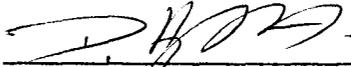
A la Universidad de Puerto Rico por hacer posible mi permanencia en su Departamento de Física en febrero de 1989 y realizar los principales cálculos de ésta tesis, haciendo uso de su equipo de cómputo.

Al Centro de Investigaciones Geofísicas de la Universidad de Costa Rica, por facilitarme el acceso al equipo de cómputo de su laboratorio.

Y en forma muy especial al Dr. Luis F. Fonseca, de la Escuela de Física de la Universidad de Costa Rica, por su guía y confianza.

Esta tesis fue aceptada por la Comisión del Programa de Estudios de Posgrado en Física de la Universidad de Costa Rica, como requisito parcial para optar al grado de Magister Scientiae.

Tribunal

 _____ Dr. Luis F. Fonseca Zamora	Profesor Consejero
 _____ Dr. Daniel Azofeifa Alvarado	Comité Asesor
 _____ Dr. Javier F. Soley Alfaro	Comité Asesor
 _____ Dr. Guy de Térmond Peralta	Director del Programa de Estudios de Posgrado en Física
 _____ Dr. Luis Estrada Navas	Decano del Sistema de Estudios de Posgrado
 _____ William Vargas Castro	Candidato

## INDICE.

Sección	Página
Introducción .....	1
Ondas de polarización y oscilaciones de superficie .....	6
Modos naturales de oscilación en medios conductores esféricos, en el límite electrostático .....	19
Intensificación del campo eléctrico por esferoides en el régimen electrostático .....	25
Formalismo de la matriz de transición y aplicaciones para dispersores esféricos en régimen electrodinámico ...	29
Extensión del formalismo de la matriz T a sistemas de dos dispersores .....	48
Intensificación por parte de sistemas de dos dispersores esferoidales con simetría axial .....	54
Formalismo de secciones eficaces y la matriz T .....	61
Rotación de la matriz de transición y sistemas de dos dispersores esferoidales en el límite electrostático ....	67
Conclusiones .....	82

Referencias .....	85
Apéndice A: Expansión de una onda plana en multipolos ...	92
Apéndice B: Matriz de traslación de las soluciones elementales a la ecuación de Hemholtz .....	97
Apéndice C: Programa para evaluar el campo resultante de la onda incidente plana y la dispersada .....	100
Apéndice D: Programa para calcular la matriz de transición con dispersores de forma esferoidal .....	112
Apéndice E: Cálculo del operador matricial de rotación en la representación de paridad y la matriz T .....	129
transformada.	
Apéndice F: Cálculo de la matriz de transición efectiva de un sistema de dos dispersores trasladados en forma simétrica respecto al origen del sistema de referencia .....	138

## RESUMEN.

Utilizando la teoría expuesta en 1971 por P.C. Waterman, en relación con la dispersión de radiación por medios finitos, se estudia la interacción de materiales conductores con luz incidente (de las regiones infrarroja, visible y ultravioleta). El carácter electrodinámico de ésta teoría, fundamentada en la condición de frontera extendida, la hace aplicable incluso a dispersores cuyas dimensiones sean comparables a la longitud de onda de la radiación incidente.

Se extiende el formalismo para considerar sistemas de dos dispersores, haciéndose una deducción distinta a la expuesta en 1973 por Peterson y Ström; pero de hecho conducente al mismo resultado: la matriz de transición efectiva del sistema en términos de las matrices de transición de cada dispersor aislado y de los operadores de traslación. Esta nueva deducción es una generalización de las ideas expuestas por Waterman en 1979 cuando desarrolló con mayor claridad el formalismo de la matriz de transición para un solo dispersor, recurriendo a principios de conservación de flujo; dejando de lado la aplicación del principio de Huygens.

Con el propósito de estudiar la dispersión por sistemas de dos partículas esferoidales idénticas de plata, con diferentes orientaciones relativas, se expone la teoría necesaria para la rotación de la matriz de transición hasta obtener la forma explícita del operador de rotación en la representación de paridad.

Ya con todo el formalismo a disposición, se realizan cálculos para sistemas de dos esferoides prolatos de plata, cuyas dimensiones son pequeñas en relación con la longitud de onda de la radiación incidente obteniéndose dos picos de resonancia en los espectros de intensidad; y mostrándose que la posición de las resonancias depende exponencialmente de la separación entre las partículas del sistema, corriéndose al rojo al disminuir la separación y siendo más pronunciado el efecto para la resonancia de mayor intensidad. También, la posición de las resonancias depende sinusoidalmente de la orientación relativa de los esferoides manifestándose un corrimiento hacia el rojo al incrementar el giro de los esferoides a partir de una geometría con simetría axial; siendo el efecto menos pronunciado que el mencionado antes al referirnos a la separación. En cuanto a la intensidad de las resonancias, en general ésta disminuye con la distancia de separación de las partículas, si bien en la literatura reciente se reporta la existencia de distancias críticas para ciertos sistemas. La intensidad aumenta con el ángulo de giro de los esferoides.

Se interpreta la existencia de una de las resonancias como debida a la excitación de las oscilaciones de superficie y electrones ligados de la plata; en tanto la otra es un efecto del acercamiento de las partículas y de su interacción mutua.

## ABSTRACT.

The interaction of conducting media with incident light (in the infrared, visible and ultraviolet ranges) is studied using P.C. Waterman theory on radiation scattering by finite media (1971). The theory's electrodynamic character, founded on the extended boundary value condition, makes it applicable to scattering bodies whose dimensions are comparable to the wavelength of the incoming radiation.

The formalism is extended to cover two scattering bodies systems. The extension is different from Peterson and Ström's (1973) however the same results are obtained, namely: the systems's effective transition matrix in terms of the transition matrices of each isolated scattering body and the translation operators. The new approach is a generalization of the ideas expressed by Waterman in 1979, when he developed with greater clarity the transition matrix formalism for one body scattering. Waterman called on principles of flux conservation, leaving aside the explicit application of Huygen's Principle.

The aim is to study the scattering by a system of two identical silver spheroids in different relative orientations. The necessary theory for the rotation of the transition matrix is presented, up to obtaining the explicit form of the rotation operator in the parity representation.

Once the full formalism is at our disposal, calculations for two prolate silver spheroid systems are made. The dimensions

of the spheroids are small relative to the wavelength of the incoming radiation. Two resonance peaks appear in the intensity spectrum, the position depends exponentially on the systems' particle separation. There is a red shift with a decrease in the separation, and the effect is more pronounced for the greater intensity resonance. We also find that the resonances position depends sinusoidally on the relative orientation of the spheroids, showing a red shift when there is an increase in the rotation of the spheroids from an axial symmetry position. However, the effect is less pronounced than the separation dependent one. In general, the intensity of the resonances decreases with the particles separation distance, although there are recent published reports about the existence of critical distances for certain systems. The intensity increases with the system's rotation angle.

The existence of one of the resonances is interpreted as being due to the excitation of surface oscillations and bounded silver electrons, while the existence of the other is due to the particles moving together and their mutual interaction.

## LISTA DE TABLAS.

Pág.	Tabla
59	Tabla 7.1 Longitudes de onda de resonancia de los dos picos presentes en el espectro de dos esferoides prolatos con sus semiejes mayores alineados en X y separados por una distancia d incidiendo luz por el eje Z observando en la punta del sistema (conjunto de la figura 7.3).
77	Tabla 9.1 Longitudes de onda de resonancia de los dos picos presentes en los espectros de intensidad del sistema mostrado en la figura 9.1. $\lambda_1$ se refiere al pico de mayor intensidad y $\lambda_2$ al de menor intensidad.
80	Tabla 9.2 Longitudes de onda de resonancia de los dos picos presentes en el espectro del sistema mostrado en la figura 9.5.

## LISTA DE ILUSTRACIONES Y FIGURAS.

- | Pág. | Figura  |
|------|---|
| 11   | Fig. 2.1 Variación con la frecuencia relativa, de las partes real e imaginaria del número de onda normalizado, para oscilaciones transversales. La línea continua representa la parte real y la punteada la parte imaginaria.   |
| 12   | Fig. 2.2 Variación con la frecuencia relativa, de las partes real e imaginaria del número de onda normalizado, para oscilaciones longitudinales. La línea continua representa la parte real y la punteada la parte imaginaria.  |
| 14   | Fig. 2.3 Variación de la componente paralela del número de onda de la oscilación transversal en la interfase "vacío-metal" con los parámetros de Drude correspondientes a la plata.   |
| 16   | Fig. 2.4 Dependencia de la transmisión con la frecuencia al incidir radiación desde el vacío sobre un plano semi-infinito de plata. La curva continua supone una incidencia a $80^\circ$ y la curva de segmentos es para incidencia a $10^\circ$ . La curva de puntos se refiere a incidencia a $80^\circ$ en ausencia de componentes longitudinales en el medio conductor. |

- 18 Fig. 2.5 Absorción de radiación por parte de una lámina de plata de 13 Angstrom siendo el ángulo de incidencia de  $80^\circ$  y  $\xi=50$ . La curva de puntos supone una solución en ausencia de componentes longitudinales en el medio conductor.
- 27 Fig. 4.1 Resonancia e intensificación por parte de objetos metálicos de plata, de geometría esférica y esferoidal, en el límite electrostático. La curva de segmentos representa la intensidad para la esfera y la continua para el esferoide.
- 33 Fig. 5.1 Esfera  $S_0$  que inscribe al dispersor  $S$  y esfera  $S_1$  inscrita por el dispersor, geometría básica para aplicar la condición de frontera extendida.
- 45 Fig. 5.2 Corrimiento hacia el rojo y disminución de la intensidad del campo electromagnético sobre la superficie del dispersor esférico de plata, de 50 nm de radio. La curva de segmentos corresponde a un quinto del espectro de una esfera de 5 nm.
- 46 Fig. 5.3 Manifestación del modo cuadrupolar en el campo sobre la superficie de un dispersor esférico de plata, de 50 nm de radio, observándose a  $45^\circ$  (línea continua) y a  $90^\circ$  (línea de segmentos) con respecto a la dirección con que incide.

- 48 Fig. 6.1 Geometría y notación para un sistema compuesto de dos dispersores.
- 54 Fig. 7.1 Sistema dispersor de dos esferas de plata de 5,0 nm cada una, con una distancia mínima de separación de 1 nm incidiendo radiación por el eje X y observándose a una distancia de 11,0 nm sobre el eje Z.
- 55 Fig. 7.2 Espectro de un sistema de dos esferas de plata ligeramente separadas observándose en el eje axial a 0,5 nm de la superficie de una de las esferas.
- 57 Fig. 7.3 Espectro calculado para un sistema de dos esferoides de plata cuyos semiejes son  $a=5,0$  nm;  $b=5,556$  nm, separados por una distancia variable, alineados con sus semiejes mayores sobre el eje X. El pico de mayor amplitud corresponde al sistema de esferoides en contacto mutuo. Los restantes picos corridos hacia el azul, y con intensidades decrecientes, corresponden a distancias de separación crecientes.
- 58 Fig. 7.4 Espectro de un sistema de dos esferoides de plata de semiejes  $a=5,0$  nm;  $b=5,556$  nm; desplazados en el eje X y con sus semiejes mayores paralelos al eje Z, incidiendo la radiación por el eje Z polarizada en X.

- 60 Fig. 7.5 Curvas de regresión que describen el comportamiento exponencial de la longitud de onda de las resonancias del sistema mostrado en la figura 7.3, para diferentes valores de la distancia de separación entre esferoides.
- 62 Fig. 8.1 Incidencia del campo resultante sobre el receptor dándose una extinción debido a la presencia del dispersor.
- 75 Fig. 9.1 Sistema dispersor formado por dos esferoides prolatos de plata desplazados en el eje X y estando uno de ellos girado hacia el otro.
- 76 Fig. 9.2 Espectro de intensidad para el sistema de dos esferoides de plata, con distintos ángulos de giro de un elipsoide hacia el otro.
- 76 Fig. 9.3 Espectro de intensidad del sistema de dos esferoides de plata siendo el punto de observación opuesto al utilizado en los cálculos de la figura 9.2.
- 78 Fig. 9.4 Dependencia sinusoidal de la posición de las resonancias con el ángulo de giro de un esferoide hacia el otro.

- 79 Fig. 9.5 Sistema de dos esferoides de plata, con simetría axial. La radiación incide por el eje Z, polarizada en X y observándose sobre el eje X; en  $r=11,112$  nm; el radio de la esfera de inclusión del conjunto.
- 80 Fig. 9.6 Espectro del sistema mostrado en la figura 9.5 para distintos ángulos de giro en ambos esferoides, uno hacia el otro.
- 81 Fig. 9.7 Dependencia sinusoidal de los picos de resonancia presentes en el sistema mostrado en la figura 9.5.
- 111 Fig. C.1 Tiempo requerido en el cálculo de la intensidad del campo de un esferoide y de un "cluster" formado por dos elipsoides simétricamente desplazados del origen, utilizando una computadora IBM 4381. No se incluye ejecución de rotación de la matriz de transición.

## 1. INTRODUCCION.

El objetivo básico de ésta tesis es calcular la intensidad de las ondas electromagnéticas en las cercanías de objetos metálicos finitos, de geometría simple, y parejas de éstos, sobre los que incide radiación monocromática coherente. Interpretar las resonancias presentes en base a la respuesta de los "electrones libres" del medio material y la contribución de "electrones ligados" estudiando el efecto del acercamiento y la orientación relativa cuando el sistema dispersor se compone de dos partículas esferoidales.

El estudio de la interacción de luz con medios finitos conductores forma parte de los pasos iniciales dados por la Física Clásica una vez finalizado el período de asentamiento del electromagnetismo con la publicación de "A treatise on Electricity and Magnetism" por James Clerk Maxwell en 1865. Rayleigh en 1871, Mie en 1908 y Stratton en 1940 se cuentan entre quienes iniciaron el estudio del problema de la dispersión de luz.

Recientemente con el desarrollo alcanzado en la fabricación de materiales inhomogéneos y en las técnicas espectroscópicas, se ha incrementado el interés en el estudio de los campos electromagnéticos en las cercanías de dispersores metálicos inmersos en un sustrato no conductor, debido al efecto de intensificación que se produce.

Por ejemplo, la intensificación en el efecto Raman, observada en 1978 por Fleischmann, Van Duyne y Creighton, al depositar las moléculas en estudio sobre partículas de plata, (Moskovits, 1985) se atribuye hoy en día principalmente a la existencia de campos eléctricos locales muy intensos en relación a la amplitud del campo incidente. A éste mismo

fenómeno de intensificación se relaciona la absorción anómala de los metales granulares en el visible (Sen y Tanner en 1982; Carr, Perkowitz y Tanner en 1985; Claro y Fuchs en 1986; Kim y Tanner en 1989).

Así el tema de la dispersión de luz por parte de medios finitos metálicos, que fue tratado hace mucho tiempo, es de nuevo objeto de investigación por su amplia gama de aplicaciones tecnológicas.

En 1971 P.C. Waterman propone un formalismo que a partir de la ecuación vectorial de Hemholtz y de la expansión de los campos electromagnéticos en términos de soluciones elementales a dicha ecuación, aplicando el Principio de Huygens, permite el cálculo de campos locales.

El mismo Waterman expone en 1979 con mayor claridad los fundamentos que justifican la aplicación de la condición de frontera extendida, pudiéndose así establecer el campo electromagnético dispersado a partir de la expansión del campo incidente por medio de la matriz de transición.

El mencionado formalismo ha sido aplicado en el cálculo de secciones eficaces (absorción y dispersión) y campos locales para objetos metálicos esféricos, esferoidales y cilíndricos: Barber y Yeh (1975); Barber, Chang y Massoudi (1983); Cline, Barber y Chang (1986).

La extensión al formalismo de Waterman, para considerar la dispersión por parte de sistemas compuestos de varios objetos finitos fue realizada por Peterson y Ström en 1973. Dadas las matrices de transición de cada uno de los miembros del sistema, se calcula una matriz efectiva que se trata en forma semejante a un único dispersor. Sólo cálculos de campos

lejanos para el caso de dos esferas conductoras fueron presentados.

Si "d" representa una dimensión característica del dispersor, " $\lambda$ " la longitud de onda de la luz incidente y "r" la distancia desde el dispersor al punto de observación, la aproximación de campo cercano supone que  $d \ll r \ll \lambda$ ; la de campo intermedio que  $d \ll r \cong \lambda$  y para el campo lejano  $d \ll \lambda \ll r$ . El prestar atención a la relación entre " $\lambda$ " y "d" permite definir los regímenes electrostático y electrodinámico siendo en el primer caso  $\lambda \gg d$  y en el segundo  $\lambda \cong d$ . Otro término comúnmente usado es el de zona radiativa el cual supone puntos de observación muy alejados del dispersor, esto es,  $r \gg d$ .

Otros formalismos de naturaleza electrostática han sido utilizados en el estudio de la intensidad de campos cercanos a objetos metálicos esféricos y conglomerados de éstos (Claro en 1984; Liver, Nitzan y Gersten en 1984; Martinos en 1984 ; Fuchs y Claro en 1987; Martinos en 1989). A diferencia de los formalismos electrostáticos, la teoría de matriz T ha probado ser más general pues puede aplicarse en régimen electrodinámico y no presenta divergencias en sistemas particulares (dispersores en contacto mutuo). Potencialmente está en capacidad de ser aplicada para dispersores de forma arbitraria y conjuntos de éstos, brindar información sobre contribuciones de los diversos multipolos al campo electromagnético resultante y establecer dependencias angulares y radiales del campo dispersado.

Este potencial del formalismo de matriz T ha sido aprovechado en 1989 por Cruz, Fonseca y Gómez en el estudio de sistemas de dos dispersores esferoidales con alto grado de simetría, en relación al campo incidente, tanto en el régimen electrostático como electrodinámico, brindándose información

sobre términos multipolares y dependencia de la intensidad con la distancia de separación entre las partículas del sistema.

En ésta investigación se pretende estudiar la dispersión por parte de sistemas de dos esferoides idénticos prestando atención a la posición de las resonancias en función de la distancia de separación de los esferoides o la orientación relativa de éstos; a la vez se estudian cuales configuraciones, de las analizadas, producen una mayor intensificación del campo eléctrico local. Así se tendrá una mayor comprensión sobre los efectos de agrupamiento de partículas metálicas y la dependencia de las resonancias e intensificación del campo, de parámetros que caracterizan al sistema. Ello constituye una fase necesaria para proceder, en futuros estudios, a considerar sistemas de muchas partículas: medios granulares metálicos inmersos en una matriz de material cerámico (cermet), en los cuales tanto el campo local como el campo del medio efectivo son importantes. En éste sentido Gómez, Fonseca, Rodríguez, Velázquez y Cruz (1985) ya han analizado las limitaciones de las teorías de medio efectivo existentes (Maxwell-Garnett y Bruggeman) y propuesto modelos en los cuales la correlación entre partículas (dispersión múltiple) y la forma de los gránulos sean tomadas en cuenta. También han comentado la limitación de éstos modelos en el límite de gránulos muy pequeños debido a la no inclusión de los efectos cuánticos de tamaño.

Desde la perspectiva de la electrodinámica clásica, se presenta una revisión a aquellas propiedades de los medios conductores (modos naturales de oscilación por parte de los electrones de conducción) que en las regiones infrarroja, visible y ultravioleta cercana, son fundamentales para modelar la interacción de la radiación incidente con éste tipo de medios materiales (sección 2). Se presta atención a

la forma del dispersor partiendo de objetos esféricos y procurando modelar el efecto de la excentricidad al considerar dispersores esferoidales. Esto se realizará en las condiciones de aplicación del límite electrostático (secciones 3 y 4).

Para estudiar la dispersión en el régimen electrodinámico, primero se expone la "teoría de matriz de transición" o "condición de frontera extendida" (sección 5) y luego se aplica en el cálculo de campos locales. El formalismo es extendido para aplicarlo a sistemas dispersores compuestos, específicamente parejas de esferas y esferoides (sección 6). Cálculos de sistemas con simetría axial son discutidos en la sección 7 procediéndose luego a exponer la teoría requerida para la rotación de la matriz de transición (sección 9). Como se mencionó antes, ello ha permitido tratar la dispersión debida a parejas de esferoides con diferentes orientaciones y separación relativa, estudiando como esto influye en la posición espectral de las resonancias y en el grado de intensificación. Las resonancias se presentan al utilizar como dispersores medios ópticamente activos, lo que en esta investigación significa medios con función dieléctrica negativa en su parte real para ciertas frecuencias dentro del ámbito antes mencionado. En la sección 8 se expone el formalismo de secciones eficaces en el contexto de la teoría de matriz de transición.

El medio activo considerado es la plata. Esta escogencia se debe a que experimentalmente se ha puesto en evidencia que, de los metales, la plata uno de los materiales que produce mayor intensificación del campo electromagnético.

## 2. ONDAS DE POLARIZACION Y OSCILACIONES DE SUPERFICIE.

Un sólido conductor puede considerarse para la mayoría de los procesos, como la superposición de dos sistemas bien diferenciados: el retículo cristalino y el gas de electrones de conducción. En su interacción con la radiación incidente, dependiendo de la frecuencia de ésta, será uno u otro componente quien determinará el proceso; y será indispensable o no considerar la interacción entre los "electrones libres" y núcleos iónicos.

Ejemplos extremos lo constituyen, en el primer caso, los estudios cristalográficos en los cuales se obtiene información sobre la geometría del retículo recurriendo a su interacción con rayos X y en el segundo, el efecto de apantallamiento del campo electromagnético por parte de los medios metálicos en bajas frecuencias (visible e infrarrojo).

La propagación de una onda electromagnética por un material dieléctrico, y su grado de atenuación y dispersión, está determinada por tres procesos básicos. La absorción electrónica relacionada con transiciones interbanda predomina en el ultravioleta en tanto que en el infrarrojo son la dispersión de Rayleigh y la absorción vibratoria los procesos dominantes. La dispersión de Rayleigh es debida a las variaciones locales del índice de refracción del medio las cuales se originan en cambios de densidad y composición del material. La respuesta de los núcleos iónicos se da en términos de la absorción vibratoria y la consiguiente excitación de fonones. La existencia de impurezas también contribuye a la atenuación y dispersión de la onda y si los cambios en densidad y composición del material son de dimensiones apreciables (en relación a la longitud de onda de la radiación transmitida ) se presentará también la dispersión de Mie.

Tratándose de un medio conductor, la respuesta de éste a la luz incidente se da básicamente por parte de los "electrones libres". La absorción por "fonones" se da en frecuencias inferiores a  $10^{13}$  Hz, hacia el infrarrojo lejano.

Respecto a las interacciones a las que está sujeto uno cualquiera de los electrones de conducción, la interacción de los núcleos iónicos es contrarestanda por los demás electrones de conducción, esto bajo la suposición de que ambos componentes del sistema (núcleos y electrones) producen distribuciones medias de carga uniformes y de igual magnitud. Los electrones de conducción se consideran como un gas cuántico cuyos enrarecimientos y compresiones respecto a la distribución media, originan oscilaciones eléctricas de tipo longitudinal. Estas oscilaciones son llamadas "ondas de polarización" y constituyen un modo de oscilación del sistema caracterizado por una frecuencia natural  $\omega_p$  dada por

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4 \pi e^2 n}{m}}, \quad (2.1)$$

"n" es el número de "electrones de conducción" por unidad de volumen y "m" la masa efectiva de éstos. Esta "frecuencia de plasma" para la mayoría de medios conductores se encuentra en la región ultravioleta y las respectivas energías son del orden de los 10 eV.

Los movimientos colectivos de los electrones pueden verse perturbados por la agitación térmica al punto de que se impone un límite superior al número de onda posible para las oscilaciones de polarización, dado por el cociente entre la frecuencia de plasma y la velocidad de Fermi (Davidov, 1981). La excitación de éstas ondas puede realizarse mediante electrones rápidos o radiación (Raether, 1980).

Para medios conductores finitos, a nivel de la superficie, los electrones de conducción también participan de movimientos colectivos. Estas oscilaciones eléctricas y magnéticas son de tipo transversal y su propagación se da en principio sobre la superficie (en un contexto más amplio, sobre la interfase) pudiéndose extender a partir de ésta en uno y otro sentido con decaimientos exponenciales. También mediante luz es posible excitar las oscilaciones de superficie, si bien no en el caso de un plano conductor semi-infinito (pues no se verifica la conservación del momentum) sí para una lámina, esfera, esferoide; en general medios finitos.

El parámetro físico que incorpora las características del medio material determinante para la existencia y propagación de ondas electromagnéticas es la función dieléctrica  $\epsilon(k, \omega)$  con "k" como número de onda y " $\omega$ " la frecuencia de la radiación propagada. Su definición está implícita en las ecuaciones de Maxwell pues mediante el uso de la ley de Ohm y la suposición de campos armónicos en el tiempo, se muestra que

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + i \frac{4\pi}{\omega} \sigma(k, \omega) \quad , \quad (2.2)$$

siendo " $\sigma$ " la conductividad eléctrica del medio. Según se trate de ondas "transversales" o "longitudinales" las respectivas relaciones de dispersión son:

$$\epsilon(k_t, \omega) = (c/\omega)^2 k_t^2 \quad , \quad (2.3a)$$

$$\epsilon(k_l, \omega) = 0 \quad ; \quad (2.3b)$$

donde las formas explícitas para la función dieléctrica se obtienen una vez evaluada la conductividad. Para ello,

partiendo de la ecuación de transporte de Boltzmann, bajo la aproximación de tiempo de relajación  $\tau$ ,

$$\partial_t f + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f - \frac{e\vec{E}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f = - \frac{f - f_0}{\tau} , \quad (2.4)$$

con " $f_0$ " como distribución de equilibrio de Fermi-Dirac y " $f$ " la distribución real; cuya diferencia con  $f_0$  se atribuye al efecto del campo eléctrico sobre el gas de electrones y si la densidad de corriente es

$$\vec{J} = -n e D \int \vec{v} f d^3v , \quad (2.6)$$

con  $D^{-1} = (4\pi/3) v_f^3$ , se obtienen las componentes del tensor de conductividad eléctrica

$$\sigma_{ij} = n e^2 D \int \frac{\tau(\vec{v}) v_i v_j (-\partial_{\epsilon} f_0)}{1 - i(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v}) \tau} d^3v . \quad (2.7)$$

Bajo la hipótesis de un medio material isotrópico, en el límite  $k \rightarrow 0$  se obtiene la expresión propia del "modelo de Drude"

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau)} , \quad (2.8)$$

que describe una función dieléctrica local. En éste caso la función es la misma para ambas componentes, transversal y longitudinal. Si no se impone éste límite, se obtienen las expresiones para la función dieléctrica no local (Melnyk y Harrison, 1970)

$$\epsilon(k, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau)} \cdot Q(k, \omega) , \quad (2.9a)$$

siendo los respectivos factores de corrección "Q" dados por:

$$Q(k_t, \omega) = \frac{3}{2a^2} \cdot \left\{ \frac{1 + a^2}{a^2} \cdot \tan^{-1} a - 1 \right\}, \quad (2.9b)$$

$$Q(k_t, \omega) = \frac{3}{a^2} \cdot \left\{ 1 - \frac{\tan^{-1} a}{a} \right\} \left\{ 1 + \frac{i}{\omega\tau} \left( 1 - \frac{\tan^{-1} a}{a} \right) \right\}^{-1}; \quad (2.9c)$$

con

$$a^2(k) = - \frac{k^2 v_f^2}{(\omega + i/\tau)^2}. \quad (2.9d)$$

Al resolver, las ecuaciones (2.3), con aproximación de segundo orden en la expansión de la tangente inversa, se han obtenido los números de onda normalizados:

$$K_t^2 = \frac{\chi - \eta}{\chi + \frac{1}{5} \left[ \frac{v_f}{c} \right]^2 \chi^2 \eta^3}, \quad (2.10a)$$

$$K_l^2 = 15 \left[ \frac{v_f}{c} \right]^2 \frac{\xi (\chi - \eta)}{[(\chi \eta)^2 (5i + 9\chi \eta)]}, \quad (2.10b)$$

con  $\chi = \frac{\omega}{\omega_p}$  como frecuencia relativa,  $\xi = \omega_p \tau$ ,  $\eta = \frac{\xi}{i + \chi \eta}$  y el número de onda normalizado dado por  $K=(c/\omega)k$ .

Las partes reales de éstos números de onda determinan las frecuencias de las respectivas componentes en tanto que su grado de amortiguamiento depende de la parte imaginaria. Las figuras 2.1 y 2.2 resumen el comportamiento de éstos

números de onda en función de la frecuencia relativa. Los parámetros de Drude utilizados han sido los de la plata, a saber, una frecuencia de plasma de  $1,40 \cdot 10^{16}$  Hz, lo cual supone una longitud de onda de 134,8 nm y una energía de 9,20 eV. El tiempo de relajación se ha escogido de modo que  $\omega_p \tau = 550$ ; siendo la velocidad de Fermi  $1,39 \cdot 10^8$  cm/s.

Las ondas transversales, para frecuencias menores a la de plasma tienden a amortiguarse, en el infrarrojo y visible, en tanto que para frecuencias mayores el decaimiento es nulo y la onda es transportada por el medio, esto es, ya en el ultravioleta el medio se vuelve transparente. Las ondas de tipo longitudinal no se dan en frecuencias inferiores a  $\omega_p$  y es justo a la frecuencia de plasma donde se manifiestan.

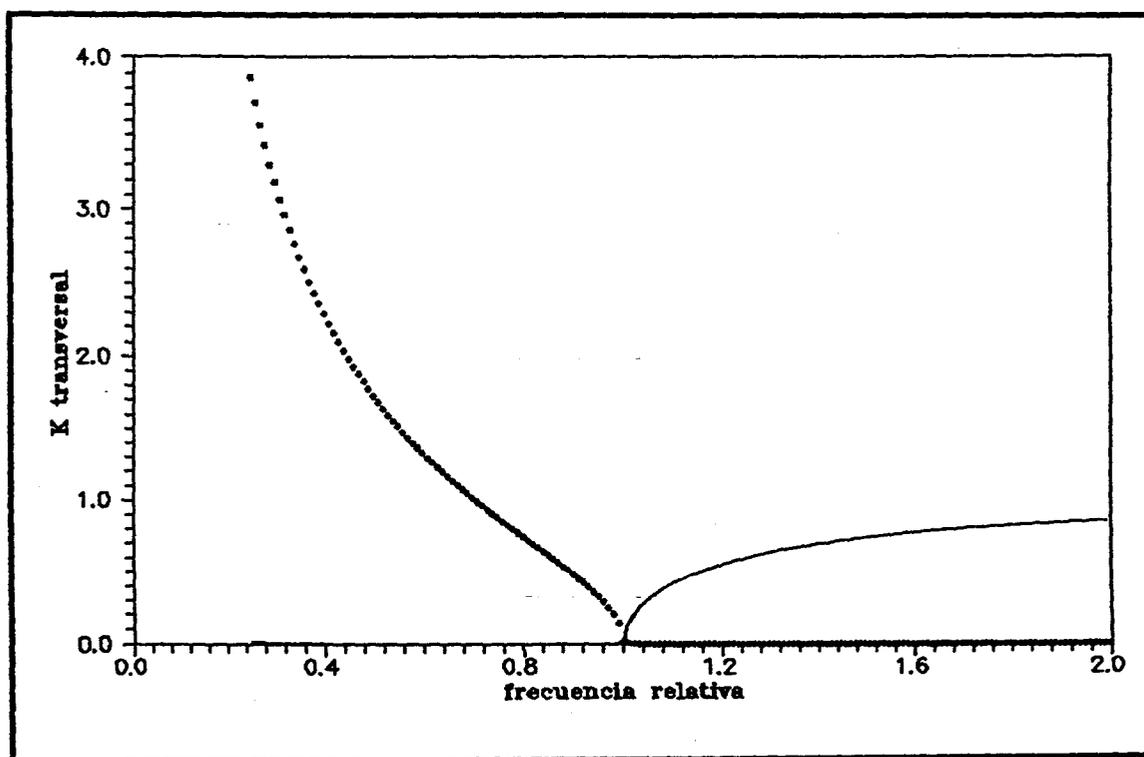


Fig. 2.1 Variación con la frecuencia relativa, de las partes real e imaginaria del número de onda normalizado, para oscilaciones transversales. La línea continua representa la parte real y la punteada la parte imaginaria.

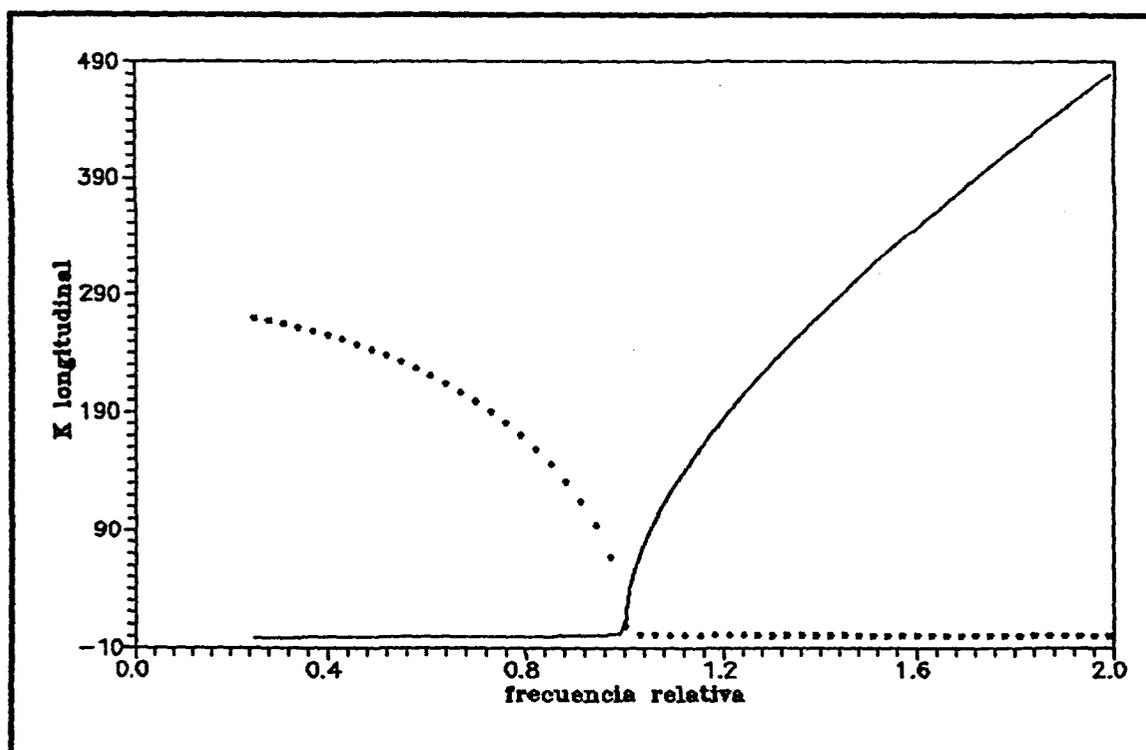


Fig. 2.2 Variación con la frecuencia relativa, de las partes real e imaginaria del número de onda normalizado, para oscilaciones longitudinales. La línea continua representa la parte real y la punteada la parte imaginaria.

La presencia de una interfase plana dieléctrico-metal impone restricciones al número de onda perteneciente a la oscilación electromagnética transversal sobre ésta. Así, para las oscilaciones de superficie es la componente del número de onda paralela a la interfase la que describe su frecuencia y grado de decaimiento. Las componentes perpendiculares del número de onda en ambos medios, el dieléctrico y el metal, describen el decaimiento de la oscilación en éstos. La continuidad de la componente paralela a la interfase, de la intensidad magnética  $\vec{H}$  y del campo eléctrico  $\vec{E}$ , imponen las condiciones:

$$\varepsilon(\omega) \cdot K_{\perp}^{\text{diel}} = -\varepsilon_d K_{\perp}^{\text{met}} \quad , \quad (2.11)$$

$$K_{\parallel}^{\text{diel}} = K_{\parallel}^{\text{met}} \quad , \quad (2.12)$$

siendo el cuadrado del número de onda normalizado  $K^2 = K_{\parallel}^2 + K_{\perp}^2$  el cual por definición satisface

$$K^2 = \varepsilon(\omega) \quad , \quad (2.13)$$

lo que permite establecer las formas explícitas de las componentes paralela y perpendiculares

$$K_{\parallel} = \sqrt{\frac{\varepsilon_d \varepsilon(\omega)}{\varepsilon_d + \varepsilon(\omega)}} \quad , \quad (2.14)$$

$$K_{\perp}^{\text{diel}} = \frac{\varepsilon_d}{\sqrt{\varepsilon_d + \varepsilon(\omega)}} \quad , \quad (2.15)$$

$$K_{\perp}^{\text{met}} = \frac{\varepsilon(\omega)}{\sqrt{\varepsilon_d + \varepsilon(\omega)}} \quad , \quad (2.16)$$

siendo " $\varepsilon_d$ " constante dieléctrica del medio inactivo (dieléctrico). El comportamiento de las partes real e imaginaria al variar la frecuencia es mostrado en la figura 2.3 destacándose el hecho de que para  $\omega = \omega_p \cdot 2^{-1/2}$  la oscilación de superficie tiende a estar localizada, esto es, al ser máxima la parte imaginaria de la componente paralela del número de onda, es para ésta frecuencia que la onda tiende a amortiguarse más rápidamente sobre la interfase.

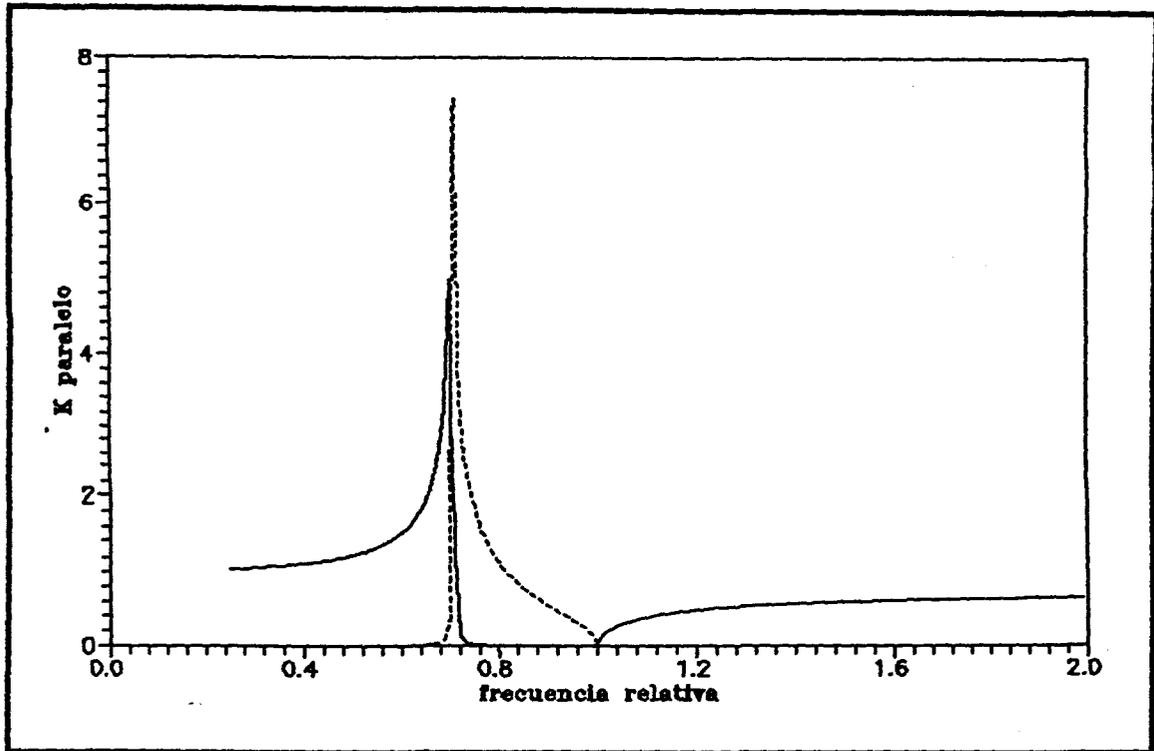


Fig. 2.3 Variación de la componente paralela del numero de onda de la oscilación transversal en la interfase "vacío-metal" con los parámetros de Drude correspondientes a la plata.

Al considerar las propiedades ópticas, esto es, la interacción del medio conductor con luz incidente y de la aplicación de las condiciones de frontera en una interfase plana entre vacío y un plano semi-infinito, se obtienen las ecuaciones de Fresnel. Los coeficientes de reflexión (R) y transmisión de las componentes transversal y longitudinal, (T y L) obtenidos a partir de aplicación de las condiciones de continuidad y de la ley de Snell generalizada (Melnik y Harrison 1970, Knittl 1976) son dados respectivamente por

$$R = \left| \frac{\alpha - \beta - \gamma}{\alpha + \beta + \gamma} \right|^2, \quad (2.17)$$

$$T = \left| \frac{2\varepsilon_0 K_{on}}{\alpha + \beta + \gamma} \right|^2, \quad (2.18)$$

$$L = \left| \frac{2\gamma K_{on}}{K_{lp}(\alpha + \beta + \gamma)} \right|^2, \quad (2.19)$$

siendo

$$\alpha = \varepsilon_t K_{on}, \quad \beta = \varepsilon_0 K_{tn}, \quad \gamma = \frac{K_{lp}(\varepsilon_0 K_{tp} - \varepsilon_t K_{op})}{K_{ln}}, \quad (2.20a)$$

$$K_{on} = \vec{K}_o \cdot \hat{n}, \quad K_{op} = \vec{K}_o \cdot \hat{p}, \quad (2.20b)$$

$$K_{ln} = \vec{K}_l \cdot \hat{n}, \quad K_{lp} = \vec{K}_l \cdot \hat{p}, \quad (2.20c)$$

$$K_{tn} = \vec{K}_t \cdot \hat{n}, \quad K_{tp} = \vec{K}_t \cdot \hat{p}, \quad (2.20d)$$

y " $\varepsilon_t$ " como función dieléctrica transversal, " $\varepsilon_0$ " la permitividad eléctrica del vacío y  $\hat{n}$  un vector unitario perpendicular a la interfase,  $\hat{p}$  paralelo a ella. Las expresiones dadas suponen una polarización "p" o sea que la intensidad magnética incidente es paralela a la interfase. Para polarización "s" el campo eléctrico es paralelo a la interfase y ella no pone en evidencia el efecto de considerar una componente longitudinal transmitida en el medio conductor (Melnyk y Harrison, 1970).

Para frecuencias de la onda incidente inferiores a la de plasma ésta es reflejada casi por completo. Para frecuencias superiores a  $\omega_p$  la onda es prácticamente transmitida y en  $\omega_p$  se da la excitación de las ondas de polarización presentes en el seno del medio conductor. En éste caso las oscilaciones superficiales de carga no se excitan pues no se verifica la conservación de la cantidad de movimiento. La figura 2.4 describe el comportamiento del coeficiente de transmisión en

función de la frecuencia relativa resaltándose el hecho de que para ángulos de incidencia cercanos a la normal las ondas de polarización no son excitadas y lo que se da es una alta transparencia del medio hacia la luz incidente. Para ángulos de incidencia cercanos a los 90 grados, un ligero incremento de la reflectividad en  $\omega_p$  indica el carácter radiativo de las ondas de polarización para luego, en frecuencias superiores darse el transporte por el medio de la componente transversal.

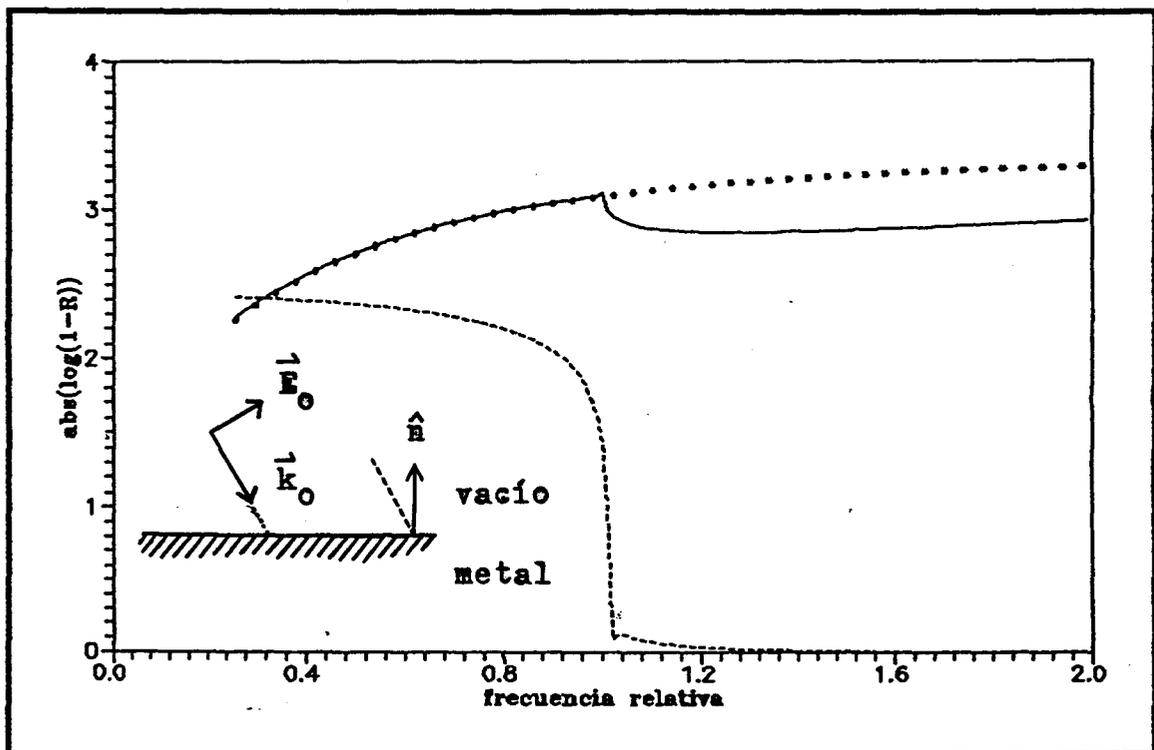


Fig. 2.4 Dependencia de la transmisión con la frecuencia al incidir radiación desde el vacío sobre un plano semi-infinito de plata. La curva continua supone una incidencia a  $80^\circ$  y la curva de segmentos es para incidencia a  $10^\circ$ . La curva de puntos se refiere a incidencia a  $80^\circ$  en ausencia de componentes longitudinales en el medio conductor.

Para una lámina metálica de espesor "d" los coeficientes de reflexión y transmisión, obtenidos mediante aplicación de las

condiciones de continuidad a  $\vec{E}$  y  $\vec{H}$  en ambas interfases y de la ley de Snell generalizada, resultan ser:

$$R = \left| \frac{AD(1-\phi_t\phi_l)^2 - BC(\phi_t - \phi_l)^2}{(1-\phi_t\phi_l)(D^2 - A^2\phi_t\phi_l) - (\phi_t - \phi_l)(B^2\phi_t - C^2\phi_l)} \right|^2, \quad (2.21)$$

$$T = \left| \frac{(A+D)\phi_t\phi_l [(\phi_t - \phi_t^*)(A-B) + (\phi_l - \phi_l^*)(A-C)]}{(1-\phi_t\phi_l)(D^2 - A^2\phi_t\phi_l) - (\phi_t - \phi_l)(B^2\phi_t - C^2\phi_l)} \right|^2, \quad (2.22)$$

con

$$A = \alpha - \beta - \gamma, \quad (2.23a)$$

$$B = \alpha - \beta + \gamma, \quad (2.23b)$$

$$C = \alpha + \beta - \gamma, \quad (2.23c)$$

$$D = \alpha + \beta + \gamma, \quad (2.23d)$$

$$\phi_t = e^{i\omega\beta d/c}, \quad (2.24a)$$

$$\phi_l = e^{i\omega K_{ln} d/c}. \quad (2.24b)$$

La absorción por parte de la lámina presenta una serie de resonancias para frecuencias superiores a la de plasma. Estas se atribuyen al establecimiento de ondas estacionarias longitudinales mediante reflexiones múltiples. Para una frecuencia  $\omega_p$  se da la excitación de las ondas de polarización a la vez que se excita una oscilación de tipo

transversal. La figura 2.5 ilustra los comentarios antes realizados.

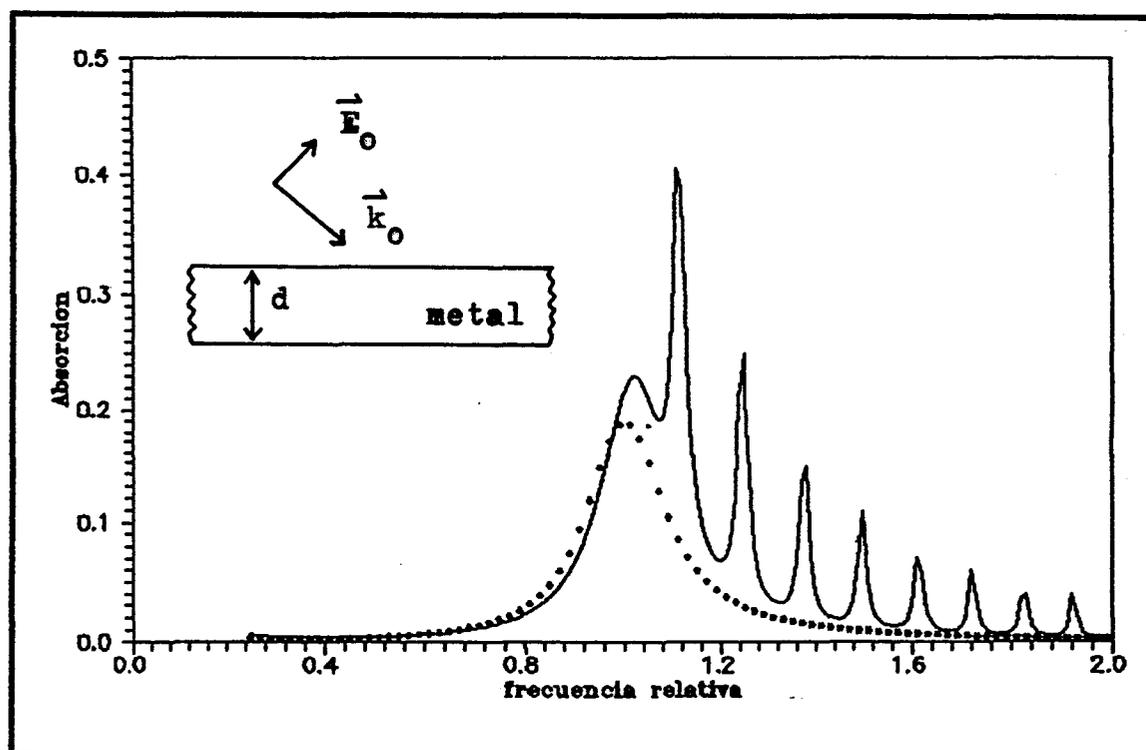


Fig. 2.5 Absorción de radiación por parte de una lámina de plata de 13 Angstrom siendo el ángulo de incidencia de  $80^\circ$  y  $\xi=50$ . La curva de puntos supone una solución en ausencia de componentes longitudinales en el medio conductor.

Resumimos lo expuesto en éste capítulo haciendo énfasis en que los electrones libres de un sólido conductor poseen modos naturales de oscilación. En el seno del material, el movimiento colectivo de los electrones produce oscilaciones de plasma u ondas de polarización que poseen una frecuencia de plasma  $\omega_p$  característica de cada material, éstas ondas son de naturaleza longitudinal. También se dan oscilaciones naturales en la superficie del material. La frecuencia de estas ondas depende de la geometría considerada pudiéndose decir que en general es una frecuencia menor a la de plasma.

### 3. MODOS NATURALES DE OSCILACION EN MEDIOS CONDUCTORES ESFERICOS, EN EL LIMITE ELECTROSTATICO.

Dada una esfera conductora, las ondas electromagnéticas asociadas a oscilaciones naturales en las densidades de carga y de corriente, están sujetas a condiciones de contorno en la superficie. Los campos eléctricos y magnéticos satisfacen la ecuación vectorial de Hemholtz y sus soluciones se construyen a partir de las soluciones a la ecuación escalar de Hemholtz distinguiéndose tres tipos de soluciones elementales (Stratton, 1941) que son

$$\text{Longitudinal : } \vec{L}_{\circ mn} = \vec{\nabla} \psi_{\circ mn} , \quad (3.1a)$$

$$\text{Transversal magnética : } \vec{M}_{\circ mn} = \vec{\nabla} \times (\vec{r} \psi_{\circ mn}) , \quad (3.1b)$$

$$\text{Transversal eléctrica : } \vec{N}_{\circ mn} = k^{-1} \vec{\nabla} \times \vec{M}_{\circ mn} , \quad (3.1c)$$

con

$$\psi_{\circ mn}(r, \theta, \phi) = \gamma_{mn}^{1/2} P_n^m(\cos\theta) \begin{bmatrix} \cos(m\phi) \\ \text{sen}(m\phi) \end{bmatrix} Z_n(kr) , \quad (3.2a)$$

$$Z_n(kr) = \begin{cases} j_n(kr) & r < a \\ h_n^{(1)}(kr) & r \geq a \end{cases} , \quad (3.2b)$$

" $\gamma_{mn}$ " como constante de normalización;  $n=1,2,\dots$  ;  $m=0,1,\dots,n$   
 $P_n^m(\cos\theta)$  función asociada de Legendre,  $j_n(kr)$  función de Bessel y  $h_n^{(1)}(kr)$  función de Hankel de primera clase.

Los campos electromagnéticos son combinaciones de éstas soluciones elementales, a saber

$$\vec{E} = \sum_{\vec{n}} ( a_n \vec{M}_n + b_n \vec{N}_n ) , \quad (3.3a)$$

$$\vec{H} = \sum_{\vec{n}} \frac{k}{i\omega\mu} ( a_n \vec{N}_n + b_n \vec{M}_n ) , \quad (3.3b)$$

con  $\vec{H} = (i\omega\mu)^{-1} \nabla \times \vec{E}$ ,  $\vec{N} = k^{-1} \nabla \times \vec{M}$ ,  $\vec{M} = k^{-1} \nabla \times \vec{N}$  donde ahora el subíndice "n" denota al conjunto de índices de las expresiones (3.1).

Si en las ecuaciones (3.3) los coeficientes  $a_n$  son nulos para todo n, el campo eléctrico posee componente radial y el magnético es perpendicular al radio vector. Sobre la superficie de la esfera se dará la superposición de distribuciones de carga asociadas a diversos multipolos eléctricos. Las oscilaciones respectivas cuyas amplitudes son determinadas por los coeficientes  $b_n$  se denominan "tipo eléctrico", "ondas E" o "transversales magnéticas".

Si son los coeficientes  $b_n$  los nulos, es el campo magnético el que posee componente radial y el eléctrico tangencial a la superficie esférica. Distribuciones oscilantes de corrientes asociadas a los respectivos multipolos magnéticos generan ondas "tipo magnético", "ondas M" o "transversales eléctricas".

Al considerar las expresiones de los campos  $\vec{E}$  y  $\vec{H}$  del tipo dado en (3.3), tanto fuera de la esfera como en su interior (haciendo la escogencia adecuada de la función radial) y la aplicación de las condiciones de contorno (continuidad de las componentes tangenciales de los campos) se obtienen ecuaciones trascendentales que restringen los valores permitidos al número de onda de las oscilaciones naturales del sistema. Para ondas tipo magnético

$$\frac{[K\rho j_n(K\rho)]}{j_n(K\rho)} = \frac{[\rho h_n^{(1)}(\rho)]}{h_n^{(1)}(\rho)}, \quad (3.4a)$$

denotando  $n$  el orden de las funciones radiales involucradas y la "prima" supone derivada respecto al argumento de la respectiva función, "K" el número de onda normalizado, " $\rho=k_0 a$ " con "a" como radio de la esfera y  $k_0=\omega/c$ . Además se considera unitaria la constante dieléctrica del medio inactivo. Para ondas tipo longitudinal

$$\frac{[K\rho j_n(K\rho)]}{K^2 j_n(K\rho)} = \frac{[\rho h_n^{(1)}(\rho)]}{h_n^{(1)}(\rho)}. \quad (3.4b)$$

Si se toma el límite electrostático resultan, respectivamente de las ecuaciones (3.4), las siguientes relaciones:

$$(n + 1) = -n, \quad (3.5a)$$

$$(n + 1) = -n K^2, \quad (3.5b)$$

de donde se concluye que no se dan modos de oscilación de tipo magnético en éste límite, pues no hay valores enteros de "n" que satisfagan la condición (3.5a), mientras que los modos eléctricos están sujetos a la condición (3.5b). Al suponer que la función dieléctrica se describe mediante el modelo de Drude, de la expresión (3.5b), en la región ultravioleta, se obtiene la frecuencia propia de éstos modos:

$$\omega_n = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \frac{n+1}{n}}} - \frac{i}{2\tau}, \quad (3.6)$$

donde la frecuencia natural de oscilación está dada por la parte real y el decaimiento al transcurrir el tiempo está gobernado por la parte imaginaria. Así el satisfacer la condición (3.5b) implica que el número de onda es complejo y su parte imaginaria determina el decaimiento espacial de la onda a partir de la interfase. De nuevo surge la presencia de las oscilaciones de superficie, ésta vez en una interfase de geometría esférica.

Las frecuencias de éstas oscilaciones superficiales son menores que la frecuencia de plasma, siendo para el modo dipolar eléctrico igual a  $\omega_p \cdot 3^{-1/2}$  siempre en el ultravioleta. En el régimen electrostático es el único modo que se manifiesta al ser excitado mediante luz. Modos superiores se perciben al aumentar las dimensiones de la esfera, arriba de los 10 nm.

Cuando una onda plana incide sobre una esfera conductora, los campos incidente, reflejado y transmitido se expanden en términos de las soluciones elementales (3.1b) y (3.1c). Las condiciones de continuidad para las componentes tangenciales son

$$\hat{r} \times \left\{ \vec{E}_{inc} + \vec{E}_{ref} \right\} = \hat{r} \times \vec{E}_{tran} \quad (3.7a)$$

$$\hat{r} \times \left\{ \vec{H}_{inc} + \vec{H}_{ref} \right\} = \hat{r} \times \vec{H}_{tran} \quad (3.7b)$$

obteniéndose de ellas los coeficientes del campo reflejado

$$a_n = \frac{j_n(K\rho) \left[ \rho j_n(\rho) \right]' - j_n(\rho) \left[ K\rho j_n(K\rho) \right]'}{j_n(K\rho) \left[ \rho h_n(\rho) \right]' - h_n(\rho) \left[ K\rho j_n(K\rho) \right]'} \quad (3.8a)$$

$$b_n = \frac{j_n(\rho) [K\rho j_n(K\rho)]' - (K\rho)^2 j_n(K\rho) [\rho j_n(\rho)]'}{h_n(\rho) [K\rho j_n(K\rho)]' - (K\rho)^2 j_n(K\rho) [\rho h_n(\rho)]'} \quad , (3.8b)$$

donde " $h_n(\rho)$ " denota la función de Hankel de primera clase, " $a_n$ " determina la contribución del  $n$ -ésimo multipolo magnético, " $b_n$ " el eléctrico. Los términos entre paréntesis cuadrado están derivados con respecto al argumento de la respectiva función de Bessel o Hankel. Las ecuaciones (3.8) forman parte de la llamada teoría de Mie.

En el límite electrostático, recurriendo a las expansiones de las funciones de Bessel y Hankel para argumentos mucho menores a la unidad, y utilizando la identidad (2.13); se obtienen los coeficientes dipolares (Stratton, 1941)

$$a_1 = \frac{i}{45} (\epsilon - 1) \rho^5 \quad , \quad (3.9a)$$

$$b_1 = - \frac{2i}{3} \cdot \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \rho^3 \quad , \quad (3.9b)$$

habiéndose utilizado la identidad (2.13) que relaciona la función dieléctrica y el número de onda normalizado.

Como se mencionó antes, el modo natural de oscilación del sistema en su término dipolar eléctrico posee una frecuencia  $\omega_1 = 3^{-1/2} \cdot \omega_p$  dentro del modelo de Drude. La relación (3.9b) corrobora que es a ésta frecuencia que se excitará este modo pues el denominador tiende a cero si  $\epsilon = -2$  lo cual se satisface en la frecuencia indicada para la parte real, siendo la parte imaginaria casi nula.

Cabe preguntarse por qué al hacer la expansión del campo eléctrico (ecuación 3.3a) no se incluyó la solución elemental de tipo longitudinal. En principio, ésta es una omisión en la teoría, justificada por el hecho de que en el ámbito de frecuencias en las que esperaríamos que se manifestase el efecto de haber considerado el término longitudinal, en realidad se da otro efecto dominante cual es el de las transiciones interbanda. Las resonancias asociadas a éstas transiciones van a apantallar por completo las posibles resonancias debidas al establecimiento de ondas estacionarias longitudinales. De los comentarios realizados en el capítulo previo se concluye que si la descripción de la función dieléctrica se hace mediante el modelo de Drude, dejando de lado las transiciones interbanda, entonces sí se hará evidente la presencia de resonancias que se atribuyen al establecimiento de ondas estacionarias longitudinales las cuales se ubican en la región ultravioleta. Es en este ámbito de energías donde el mencionado modelo tiende a perder su validez.

#### 4. INTENSIFICACION DEL CAMPO ELECTRICO POR ESFEROIDES EN EL REGIMEN ELECTROSTATICO.

Para estudiar el efecto de la excentricidad del esferoide se generaliza el estudio anterior utilizando el formalismo de Stratton. En la punta del esferoide (donde la curvatura se incrementa), de la continuidad para la componente normal del desplazamiento eléctrico, la magnitud del campo externo es

$$E = \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_d} E^{int} , \quad (4.1)$$

con " $\varepsilon_d$ " como constante dieléctrica del medio en el cual se encuentra inmerso el esferoide, " $\varepsilon(\omega)$ " la función dieléctrica del material que constituye éste, y con el campo eléctrico en la sección de la interfase correspondiente al medio activo, dado por

$$E_k^{int} = \frac{E_{ok}}{1 + \left[ \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_d} - 1 \right] \cdot A_k} , \quad (4.2)$$

donde el índice "k" denota las componentes cartesianas respectivas, " $E_o$ " la magnitud del campo eléctrico externo existente y el escalar " $A_k$ " el respectivo factor de depolarización. Para  $\varepsilon_d=1$  estos factores sólo dependen de la excentricidad "e" del esferoide

$$e = \sqrt{1 - (a/b)^2} , \quad (4.3)$$

con "a" como semieje menor y "b" mayor. Los factores de depolarización son dados para un esferoide prolato, por

$$A_x = A_y , \quad (4.4a)$$

$$A_y = \frac{1}{2} \cdot (1 - A_z) , \quad (4.4b)$$

$$A_z = \frac{1 - e^2}{e^2} \cdot \left\{ \frac{1}{2e} \cdot \text{Ln} \left[ \frac{1+e}{1-e} \right] - 1 \right\} , \quad (4.4c)$$

y para un esferoide oblato

$$A_z = \frac{1}{e^2} \cdot \left\{ 1 - \frac{\sqrt{1 - e^2}}{e} \cdot \text{sen}^{-1} e \right\} , \quad (4.5)$$

siendo válidas las expresiones (4.4a) y (4.4b). La nomenclatura de esferoide prolato supone un elipsoide con dos semiejes iguales y menores a un tercer eje; el esferoide oblato se define como aquel que posee dos semiejes iguales y mayores al tercero.

De la ecuación (4.1) y usando (4.2), con una función dieléctrica  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ , se obtiene la intensidad normalizada

$$|E|^2 = \frac{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}{\left[ (1-A) + \varepsilon_1 A \right]^2 + (\varepsilon_2 A)^2} , \quad (4.6)$$

donde el factor de depolarización "A" se calcula mediante las ecuaciones (4.4) o (4.5) según se trate de un esferoide prolato u oblato y la componente cartesiana del campo involucrado. Haciendo uso de la relación entre función dieléctrica e índice de refracción

$$\varepsilon(\omega) = (n + i k)^2 , \quad (4.7)$$

obteniéndose para la plata los valores de "n" y "k" reportados por Johnson y Christy (1972); se ha evaluado para un esferoide dado, el índice de refracción que minimiza el denominador en (4.6).

Para una esfera la resonancia corresponde a una longitud de onda de 355,7 nm y para un esferoide prolato con relación de dos entre semiejes, se da en 405,2 nm lo cual significa un corrimiento hacia el rojo (desde el ultravioleta cercano al visible). En cuanto a las intensidades relativas, para la esfera resulta ser de 471,6 y para el mencionado esferoide es unas 33 veces superior. Desde luego éste efecto de intensificación mediante incremento de la excentricidad se atribuye a la mayor curvatura del esferoide en su punta, en relación a la esfera, y por tanto la mayor concentración de carga (electrones libres) en las regiones de mayor curvatura.

La figura 4.1 muestra los picos de resonancia para la esfera y el esferoide, espectros obtenidos haciendo uso de la relación (4.6) y siendo el esferoide prolato de semiejes 5,0 nm; b=5,556 nm y la esfera de 5,0 nm de radio.

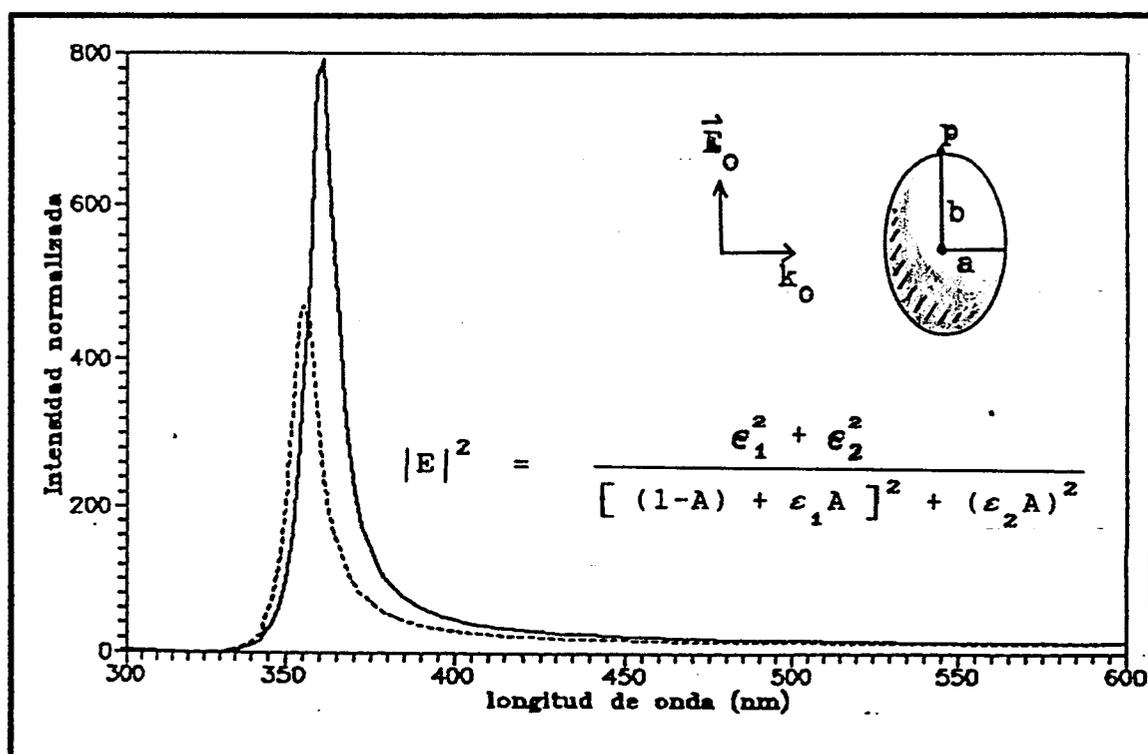


Fig. 4.1 Resonancia e intensificación por parte de objetos metálicos de Plata, de geometría esférica y esferoidal, en el límite electrostático. La curva de segmentos representa la intensidad para la esfera y la continua para el esferoide.

La escogencia de los citados valores para los semiejes implica una razón de 0,9 entre "a" y "b", la cual se usará en los cálculos mediante el formalismo de la matriz de transición donde, al considerar mayores excentricidades requiere, al ejecutar los programas implementados, mucho mayor capacidad de almacenamiento y tiempos de cómputo superiores. Dadas las limitaciones presentes en ambos aspectos, se han realizados los cálculos para la excentricidad mencionada.

La resonancia obtenida se atribuye en primera instancia a la excitación del modo dipolar eléctrico de la oscilación superficial de carga. Para la esfera se mencionó que en el límite electrostático la frecuencia natural de la oscilación es  $\omega_p \cdot 3^{-1/2}$  lo cual, para la plata supondría que la resonancia se daría en  $\lambda_1 = 233,5$  nm pero tal estimación lleva implícita la suposición de que la función dieléctrica se describe mediante el modelo de Drude. En los cálculos realizados con la ecuación (4.6) se ha usado una función dieléctrica medida experimentalmente por Johnson y Christy (1972); la cual difiere en la región ultravioleta de aquella modelada por Drude. Esta discrepancia se atribuye a la contribución de los electrones ligados de la plata, en particular los electrones "d" (Enrenreich H. y Philipp H.R., 1962).

## 5. FORMALISMO DE LA MATRIZ DE TRANSICION Y APLICACIONES PARA DISPERSORES ESFERICOS EN REGIMEN ELECTRODINAMICO.

Los anteriores modelos son altamente limitados. La teoría de Mie sólo es aplicable a dispersores esféricos; el formalismo de Stratton es de naturaleza electrostática y supone una respuesta dipolar por parte del objeto dispersor.

Un formalismo más general denominado teoría de la matriz de transición ha sido desarrollado por P.C. Waterman en 1971. Es aplicable a dispersores de forma arbitraria y tamaño aún comparable a la longitud de onda de la radiación incidente. Además su ámbito de aplicación puede incluir oscilaciones transversales y longitudinales haciéndolo aplicable por lo tanto a problemas acústicos y oscilaciones elásticas.

En el contexto de nuestro interés inmediato, los campos electromagnéticos involucrados se expanden en términos multipolares. Los coeficientes del campo dispersado se evalúan a partir de los coeficientes de la onda plana incidente y de la matriz de transición cuyos elementos son determinados por la frecuencia del haz incidente, forma y dimensiones del dispersor y condiciones de contorno. Seguidamente se expone el formalismo de la teoría de Waterman.

De la ley de Ampere en su forma diferencial, utilizando las ecuaciones constitutivas que relacionan los campos  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  con  $\vec{D}$  y  $\vec{H}$  respectivamente, y recurriendo a la ley de Ohm se obtiene

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \mu \epsilon \partial_t \vec{E} - \mu \sigma \vec{E} = \vec{0} \quad (5.1)$$

Dada la ley de Faraday, tomando el rotacional a ambos lados y en la ecuación (5.1) aplicando la derivada temporal (conmutando luego los operadores  $\partial_t$  y  $\vec{\nabla}$ ) se obtiene

$$-\vec{\nabla}_x(\vec{\nabla}_x\vec{E}) - \mu\epsilon \partial_t^2 \vec{E} - \mu\sigma \partial_t \vec{E} = \vec{0} \quad , \quad (5.2)$$

y bajo la hipótesis de que la divergencia del campo eléctrico es nula, resulta

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu\epsilon \partial_t^2 \vec{E} - \mu\sigma \partial_t \vec{E} = \vec{0} \quad . \quad (5.3)$$

El haber supuesto una divergencia nula del campo eléctrico implica una densidad neta de carga igual a cero. Ello se fundamenta en la consideración de que los núcleos iónicos producen una densidad de carga que difiere solo en signo a la que produce el gas de electrones libres.

Por otra parte, al tomar el rotacional de la ecuación (5.1), aplicando la ley de Faraday y el hecho de que la divergencia del campo magnético es nula, se muestra que

$$\nabla^2 \vec{B} - \mu\epsilon \partial_t^2 \vec{B} - \mu\sigma \partial_t \vec{B} = \vec{0} \quad . \quad (5.4)$$

Esto significa que para una región sin fuentes de carga eléctrica neta, y siendo el medio homogéneo, los vectores de campo electromagnético satisfacen la ecuación diferencial

$$\nabla^2 \vec{F} - \mu\epsilon \partial_t^2 \vec{F} - \mu\sigma \partial_t \vec{F} = \vec{0} \quad , \quad (5.5)$$

siendo  $\vec{F}$  uno de estos vectores de campo. Esta ecuación es lineal y por tanto sus soluciones se pueden construir como superposición de soluciones elementales. Al considerar una dependencia temporal armónica, se obtiene de (5.5) la llamada ecuación vectorial de Hemholtz

$$\vec{\nabla}_x \vec{\nabla}_x \vec{F} - k^2 \vec{F} = \vec{0} \quad , \quad (5.6)$$

con

$$k^2 = \mu \epsilon \omega^2 + i \mu \sigma \omega \quad . \quad (5.7)$$

Esta ecuación posee soluciones elementales de la forma

$$\vec{\Psi}_{\tau \sigma mn}(r, \theta, \phi) = \gamma_{mn}^{1/2} (k^{-1} \vec{\nabla}_x)^\tau [ kr \vec{Y}_{\sigma mn}(\theta, \phi) h_n^{(1)}(kr) ] \quad , (5.8)$$

donde  $\tau=1$  supone una solución elemental de tipo magnético y  $\tau=2$  de tipo eléctrico. El índice  $\sigma=-1, 1$  define la paridad del esférico armónico

$$Y_{\sigma mn}(\theta, \phi) = P_n^m(\cos \theta) \cdot \begin{cases} \cos(m\phi) & \sigma = -1 \\ \sin(m\phi) & \sigma = 1 \end{cases} \quad , \quad (5.9)$$

con  $n=1, 2, \dots$ ;  $m=0, 1, \dots, n$  y la constante de normalización dada por

$$\gamma_{mn} = \epsilon_m \cdot \frac{(2n+1)(n-m)!}{4n(n+1)(n+m)!} \quad , \quad (5.10)$$

con  $\epsilon_0=1$  y  $\epsilon_m=2$  para todo "m" distinto de cero. Resaltamos el hecho de que éstas soluciones son de tipo transversal,

esto es, sus divergencias son nulas y que la notación introducida arriba es solo una forma de resumir las expresiones (3.1b) y (3.1c).

La forma explícita de las soluciones elementales dadas por la ecuación (5.8) se incluyen a continuación.

(5.11)

$$\Psi_{1\sigma mn}(\vec{kr}) = \gamma_{mn}^{1/2} \frac{\sigma m}{\sin\theta} Z_n P_n^m g_{-\sigma m} \hat{\theta} - \gamma_{mn}^{1/2} Z_n \frac{dP_n^m}{d\theta} g_{\sigma m} \hat{\phi} ,$$

(5.12)

$$\begin{aligned} \Psi_{2\sigma mn}(\vec{kr}) = & \gamma_{mn}^{1/2} \frac{n(n+1)}{kr} Z_n P_n^m g_{\sigma m} \hat{r} + \gamma_{mn}^{1/2} \frac{1}{kr} \frac{\partial}{\partial r} (rZ_n) \frac{dP_n^m}{d\theta} g_{\sigma m} \hat{\theta} + \\ & + \gamma_{mn}^{1/2} \frac{\sigma m}{kr \sin\theta} \frac{\partial}{\partial r} (rZ_n) P_n^m g_{-\sigma m} \hat{\phi} , \end{aligned}$$

donde se debe entender que  $Z_n = Z_n(kr)$ ,  $P_n^m = P_n^m(\cos\theta)$  y la función  $g_{\sigma m} = g_{\sigma m}(\phi)$  definida de la forma

$$g_{\sigma m}(\phi) = \begin{cases} \cos(m\phi) & \sigma = -1 \\ \sin(m\phi) & \sigma = 1 \end{cases} . \quad (5.13)$$

Al considerar la dispersión de la onda incidente, los campos eléctricos incidente y dispersado se expanden de la siguiente manera

$$\vec{E}^{inc} = \sum_n a_n \text{Re} \vec{\Psi}_n, \quad (5.14)$$

$$\vec{E}^{disp} = \sum_n f_n \vec{\Psi}_n, \quad r \geq r_0, \quad (5.15)$$

donde  $\text{Re} \vec{\Psi}_n$  corresponde a una solución elemental regular de (5.6), en la cual la función de Hankel se sustituye por la respectiva función de Bessel, siendo la geometría prototipo la siguiente

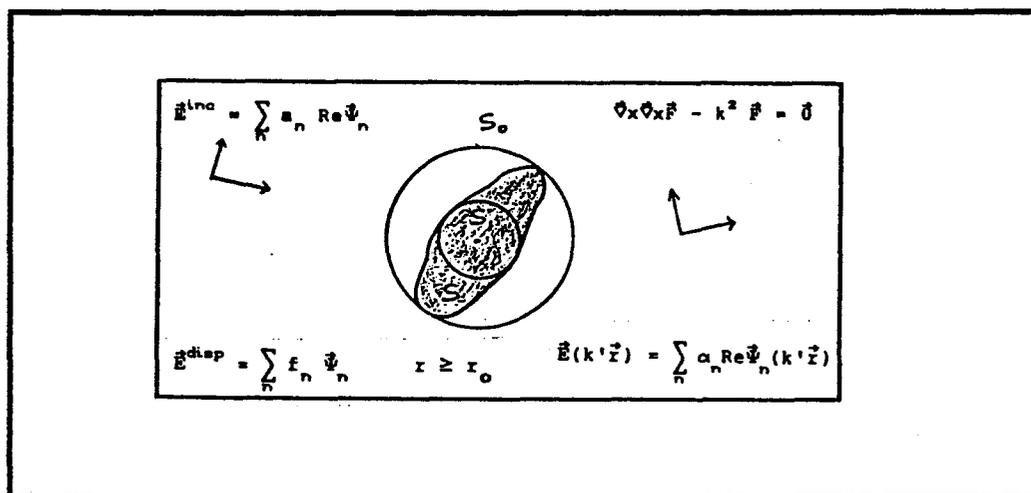


Fig. 5.1 Esfera  $S_0$  que inscribe al dispersor  $S$  y esfera  $S_1$  inscrita por el dispersor, geometría básica para aplicar la condición de frontera extendida.

Utilizando el hecho de que las funciones vectoriales  $\vec{F}$  y  $\vec{E}$  que satisfacen la ecuación de Helmholtz cumplen con la relación

$$\int d\vec{s} \cdot [(\nabla_x \vec{F}) \times \vec{E} + \vec{F} \times (\nabla_x \vec{E})] = \text{constante}, \quad (5.16)$$

(Waterman, 1979) y como tanto  $\vec{\Psi}_n$  como  $\text{Re}\vec{\Psi}_n$  son soluciones a la ecuación (5.6), al integrar la ecuación (5.16) en  $S$  (superficie del dispersor) y en  $S_o$  (superficie esférica que inscribe al dispersor) sustituyendo  $\vec{F}$  por  $\vec{\Psi}_n$  en un caso y  $\text{Re}\vec{\Psi}_n$  en el otro se obtienen respectivamente

(5.17a)

$$\int_S d\vec{s} \cdot [(\vec{\nabla}_x \vec{\Psi}_n) \times \vec{E} + \vec{\Psi}_n \times (\vec{\nabla}_x \vec{E})] =$$

$$\int_{S_o} d\vec{s} \cdot [(\vec{\nabla}_x \vec{\Psi}_n) \times \sum_n (a_n \text{Re}\vec{\Psi}_n + f_n \vec{\Psi}_n) + \vec{\Psi}_n \times \vec{\nabla}_x \sum_n (a_n \text{Re}\vec{\Psi}_n + f_n \vec{\Psi}_n)]$$

y

(5.17b)

$$\int_S d\vec{s} \cdot [(\vec{\nabla}_x \text{Re}\vec{\Psi}_n) \times \vec{E} + \text{Re}\vec{\Psi}_n \times (\vec{\nabla}_x \vec{E})] =$$

$$\int_{S_o} d\vec{s} \cdot [(\vec{\nabla}_x \text{Re}\vec{\Psi}_n) \times \sum_n (a_n \text{Re}\vec{\Psi}_n + f_n \vec{\Psi}_n) + \text{Re}\vec{\Psi}_n \times \vec{\nabla}_x \sum_n (a_n \text{Re}\vec{\Psi}_n + f_n \vec{\Psi}_n)]$$

con  $\vec{E} = \vec{E}^{\text{inc}} + \vec{E}^{\text{disp}}$ . Luego, de las relaciones de ortogonalidad

$$\frac{k}{i\pi} \int_S d\vec{s} \cdot [(\vec{\nabla}_x \text{Re}\vec{\Psi}_n) \times \vec{\Psi}_m + \text{Re}\vec{\Psi}_n \times (\vec{\nabla}_x \vec{\Psi}_m)] = \delta_{nm}, \quad (5.18a)$$

$$\frac{k}{i\pi} \int d\vec{s} \cdot [(\vec{\nabla}_x \text{Re}\Psi_n) \times \text{Re}\Psi_n + \text{Re}\Psi_n \times (\vec{\nabla}_x \text{Re}\Psi_n)] = 0 \quad , \quad (5.18b)$$

$$\frac{k}{i\pi} \int d\vec{s} \cdot [(\vec{\nabla}_x \Psi_n) \times \Psi_n + \Psi_n \times (\vec{\nabla}_x \Psi_n)] = 0 \quad , \quad (5.18c)$$

cuando la superficie de integración es esférica (Waterman, 1979), de las ecuaciones (5.17) se obtiene

$$a_n = \frac{k}{i\pi} \int_S ds [(\vec{\nabla}_x \Psi_n) \cdot (\hat{n} \times \vec{E}) + i\omega\mu \Psi_n \cdot (\hat{n} \times \vec{H})] \quad , \quad (5.19a)$$

$$f_n = - \frac{k}{i\pi} \int_S ds [(\vec{\nabla}_x \text{Re}\Psi_n) \cdot (\hat{n} \times \vec{E}) + i\omega\mu \text{Re}\Psi_n \cdot (\hat{n} \times \vec{H})] \quad , \quad (5.19b)$$

donde la integración se hace sobre la superficie del dispersor;  $\hat{n}$  denota el vector unitario normal a ésta superficie y  $(\hat{n} \times \vec{E})$ ,  $(\hat{n} \times \vec{H})$  corresponden a los campos tangenciales a la interfase (se ha utilizado la relación  $\vec{\nabla}_x \vec{E} = i\omega\mu \vec{H}$ ).

Por otro lado, dentro de una esfera  $S_1$  inscrita por la superficie del dispersor

$$\vec{E}(k, \vec{r}) = \sum_n \alpha_n \text{Re}\Psi_n(k, \vec{r}) \quad , \quad (5.20)$$

con  $r \leq r_1$  y  $k'^2 = \mu' \epsilon' \omega^2 + i\mu' \sigma' \omega$ . De nuevo, integrando la

ecuación (5.16) sobre  $S_1$  y  $S$ , con  $\vec{F} = \vec{\Psi}_n(k', \vec{r})$  en un caso y  $\text{Re}\vec{\Psi}_n(k', \vec{r})$  en otro se obtienen las relaciones

$$\alpha_n = - \frac{k'}{i\pi} \int_S ds [(\vec{\nabla}_x \vec{\Psi}_n') \cdot (\hat{n}_x \vec{E}) + i\mu' \omega \vec{\Psi}_n' \cdot (\hat{n}_x \vec{H})] , \quad (5.21a)$$

$$0 = \frac{k'}{i\pi} \int_S ds [(\vec{\nabla}_x \text{Re}\vec{\Psi}_n') \cdot (\hat{n}_x \vec{E}) + i\mu' \omega \text{Re}\vec{\Psi}_n' \cdot (\hat{n}_x \vec{H})] , \quad (5.21b)$$

donde  $\vec{\Psi}_n' = \vec{\Psi}_n(k', \vec{r})$ . Los campos tangenciales a la superficie del dispersor se expresan como

$$\hat{n}_x \vec{E} = \sum_n \alpha_n' \hat{n}_x \text{Re}\vec{\Psi}_n' , \quad (5.22a)$$

$$i\mu' \omega (\hat{n}_x \vec{H}) = \sum_n \alpha_n' \hat{n}_x (\vec{\nabla}_x \text{Re}\vec{\Psi}_n') , \quad (5.22b)$$

de modo que al ser usadas éstas en las ecuaciones (5.21) surgen condiciones para los coeficientes de las expansiones (5.22), las cuales en forma matricial se resumen en

$$\text{Re } \mathbf{M}'(\alpha'' - \alpha') = 0 , \quad (5.23a)$$

$$\mathbf{M}'(\alpha'' - \alpha') = i(\alpha'' - \alpha') , \quad (5.23b)$$

con

$$\mathbf{M}_{nm}' = \frac{k'}{\pi} \int_S d\vec{s} \cdot (\vec{\nabla}_x \text{Re}\vec{\Psi}_n') \times \vec{\Psi}_m' , \quad (5.24a)$$

$$\text{Re } M_{nn'} = \frac{k'}{\pi} \int_S d\vec{s} \cdot (\nabla_x \text{Re} \Psi_n') \times \text{Re} \Psi_n' , \quad (5.24b)$$

y  $M'$  como la matriz transpuesta de  $M$ .

En general " $M$ " es una matriz no singular, y por lo tanto los coeficientes de las expansiones de los campos internos satisfacen  $\alpha' = \alpha'$  y  $\alpha = \alpha$ . Ya con esta información, las expansiones de los campos tangenciales se introducen en las ecuaciones (5.19) obteniéndose, en notación matricial

$$a = i Q' \alpha , \quad (5.25a)$$

$$f = -i \text{Re } Q' \alpha . \quad (5.25b)$$

Se define la matriz de transición  $T$  que satisface

$$f = T a , \quad (5.26)$$

y usando las ecuaciones (5.25), se concluye que

$$T = - Q^{-1} \text{Re} Q , \quad (5.27)$$

siendo

$$Q_{nn'} = \frac{k}{\pi} \int_S d\vec{s} \cdot [\text{Re} \Psi_n' \times (\nabla_x \Psi_n') + \frac{\mu}{\mu'} (\nabla_x \text{Re} \Psi_n') \times \Psi_n'] . \quad (5.28)$$

La matriz  $T$  resulta pues un operador que permite establecer los coeficientes del campo dispersado a partir de los coeficientes de la onda incidente. Este operador incorpora la información que define la geometría del dispersor y sus dimensiones así como la energía del haz incidente.

Con objeto de escribir los argumentos a integrar en la ecuación (5.28), conviene definir

$$C_{mnm'n'} = \gamma_{mn}^{1/2} \gamma_{m'n'}^{1/2}, \quad (5.29)$$

$$\rho = kr, \quad \rho' = k'r, \quad (5.30)$$

$$s = \frac{\rho'}{\rho}, \quad t = \frac{\rho}{\rho'}, \quad p = \frac{1}{\rho}, \quad q = \frac{1}{\rho'}, \quad (5.31)$$

$$\pi_n^m = \frac{P_n^m(\cos\theta)}{\sin\theta}, \quad \tau_n^m = \frac{dP_n^m}{d\theta}, \quad (5.32)$$

$$H_n = \frac{d}{d\rho}(\rho h_n), \quad J_n = \frac{d}{d\rho'}(\rho' j_n), \quad (5.33)$$

con lo cual las componentes radial, polar y azimutal del vector  $\vec{Q} = \text{Re}\vec{\Psi}'_n \times (\vec{\nabla} \times \vec{\Psi}_n) + (\vec{\nabla} \times \text{Re}\vec{\Psi}'_n) \times \vec{\Psi}_n$  cuya integración sobre la superficie del dispersor define la matriz "Q" para materiales no magnéticos, son:

$$Q_{10mn,10'm'n'}^r = C_{mnm'n'} \left\{ \tau_n^m \tau_{n'}^{m'} g_{0m} g_{0m'} + o_m o_{m'} \pi_n^m \pi_{n'}^{m'} g_{-0m} g_{-0m'} \right\} \cdot \left\{ \frac{j_n H_{n'} - h_n J_{n'}}{r} \right\}, \quad (5.34)$$

$$Q_{20mn,20'm'n'}^r = C_{mnm'n'} \left\{ \tau_n^m \tau_{n'}^{m'} g_{0m} g_{0m'} + o_m o_{m'} \pi_n^m \pi_{n'}^{m'} g_{-0m} g_{-0m'} \right\} \cdot \left\{ \frac{s j_n H_{n'} - t h_n J_{n'}}{r} \right\}, \quad (5.35)$$

$$Q_{1\sigma mn, 2\sigma' m' n'}^r = C_{mnm'n'} \left\{ \sigma' m' \pi_{n'}^{m'} \tau_n^m g_{\sigma m} g_{-\sigma m'} - \sigma m \pi_n^m \tau_{n'}^{m'} g_{\sigma' m'} g_{-\sigma m} \right\} \cdot \left\{ \frac{\rho j_n h_{n'} + p J_n H_{n'}}{r} \right\}, \quad (5.36)$$

$$Q_{2\sigma mn, 1\sigma' m' n'}^r = C_{mnm'n'} \left\{ \sigma' m' \pi_{n'}^{m'} \tau_n^m g_{\sigma m} g_{-\sigma m'} - \sigma m \pi_n^m \tau_{n'}^{m'} g_{\sigma' m'} g_{-\sigma m} \right\} \cdot \left\{ \frac{\rho' j_n h_{n'} + q J_n H_{n'}}{r} \right\}, \quad (5.37)$$

$$Q_{1\sigma mn, 1\sigma' m' n'}^\theta = C_{mnm'n'} \operatorname{sen} \theta \left\{ n(n+1) \pi_n^m \tau_{n'}^{m'} - n'(n'+1) \pi_{n'}^{m'} \tau_n^m \right\} \cdot g_{\sigma m} g_{\sigma' m'} \cdot \left\{ \frac{j_n h_{n'}}{r} \right\}, \quad (5.38)$$

$$Q_{2\sigma mn, 2\sigma' m' n'}^\theta = C_{mnm'n'} \operatorname{sen} \theta \left\{ \operatorname{tn}(n+1) \pi_n^m \tau_{n'}^{m'} - \operatorname{sn}'(n'+1) \pi_{n'}^{m'} \tau_n^m \right\} \cdot g_{\sigma m} g_{\sigma' m'} \cdot \left\{ \frac{j_n h_{n'}}{r} \right\}, \quad (5.39)$$

$$Q_{1\sigma mn, 2\sigma' m' n'}^\theta = C_{mnm'n'} \left\{ \frac{\operatorname{sen} \theta \pi_n^m \pi_{n'}^{m'}}{kr^2} \right\} \cdot \left\{ \sigma m n'(n'+1) g_{-\sigma m} g_{\sigma' m'} h_{n'} J_n - \sigma' m' n(n+1) g_{\sigma m} g_{-\sigma m'} j_n H_{n'} \right\}, \quad (5.40)$$

$$Q_{2\sigma mn, 1\sigma' m' n'}^\theta = C_{mnm'n'} \left\{ \frac{\text{sen} \theta \pi_n^m \pi_{n'}^{m'}}{k' r^2} \right\} \cdot \left\{ \sigma mn' (n'+1) g_{-\sigma m} g_{\sigma' m'} h_n J_n - \sigma' m' n (n+1) g_{\sigma m} g_{-\sigma' m'} j_n H_{n'} \right\}, \quad (5.41)$$

$$Q_{1\sigma mn, 1\sigma' m' n'}^\phi = C_{mnm'n'} \left\{ \frac{\text{sen} \theta \pi_n^m \pi_{n'}^{m'} j_n h_{n'}}{r} \right\} \cdot \left\{ \sigma' m' n (n+1) g_{\sigma m} g_{-\sigma' m'} - \sigma mn' (n'+1) g_{\sigma' m'} g_{-\sigma m} \right\}, \quad (5.42)$$

$$Q_{2\sigma mn, 2\sigma' m' n'}^\phi = C_{mnm'n'} \left\{ \frac{\text{sen} \theta \pi_n^m \pi_{n'}^{m'} j_n h_{n'}}{r} \right\} \cdot \left\{ t \sigma' m' n (n+1) g_{\sigma m} g_{-\sigma' m'} - s \sigma mn' (n'+1) g_{\sigma' m'} g_{-\sigma m} \right\}, \quad (5.43)$$

$$Q_{1\sigma mn, 2\sigma' m' n'}^\phi = C_{mnm'n'} \text{sen} \theta g_{\sigma m} g_{\sigma' m'} \cdot \left\{ \frac{n(n+1) \pi_n^m \tau_{n'}^{m'} j_n H_{n'} - n'(n'+1) \pi_{n'}^{m'} \tau_n^m h_n J_n}{kr^2} \right\}, \quad (5.44)$$

$$Q_{2\sigma mn, 1\sigma' m' n'}^\phi = C_{mnm'n'} \text{sen} \theta g_{\sigma m} g_{\sigma' m'} \cdot \left\{ \frac{n(n+1) \pi_n^m \tau_{n'}^{m'} j_n H_{n'} - n'(n'+1) \pi_{n'}^{m'} \tau_n^m h_n J_n}{k' r^2} \right\}, \quad (5.45)$$

donde  $j_n = j_n(\rho')$  y  $h_{n'} = h_{n'}(\rho)$ . En el caso de objetos que poseen simetría azimutal (esferoides), sabemos que

$$\int_0^{2\pi} d\phi g_{\sigma m} g_{\sigma' m'} = \frac{2\pi}{\varepsilon_m} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{mm'} \{1 - \delta_{0,1-\sigma}\} \{1 - \delta_{0,1-\sigma'}\}, \quad (5.46)$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi g_{\sigma m} g_{-\sigma' m'} = \frac{2\pi}{\varepsilon_m} \delta_{-\sigma\sigma'} \delta_{mm'} \{1 - \delta_{0,1-\sigma}\} \{1 - \delta_{0,1-\sigma'}\}, \quad (5.47)$$

por lo que las formas explícitas de los elementos de la matriz Q son

(5.48)

$$Q_{10mn, 10'm'n'} = \frac{2k}{\varepsilon_m} \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'} \{1 - \delta_{0,1-\sigma}\} \{1 - \delta_{0,1-\sigma'}\} C_{mnmn'} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \int_0^\pi d\theta r^2(\theta) \operatorname{sen} \theta \left\{ \tau_n^m \tau_{n'}^m + m^2 \pi_n^m \pi_{n'}^m \right\} \cdot \left\{ \frac{j_n H_{n'} - h_{n'} J_n}{r} \right\} + \right.$$

$$\left. + \frac{e^2}{a^2} \int_0^\pi d\theta r^4(\theta) \operatorname{sen}^3 \theta \cos \theta \left\{ n(n+1) \pi_n^m \tau_{n'}^m - n'(n'+1) \pi_{n'}^m \tau_n^m \right\} \cdot \frac{j_n h_{n'}}{r} \right\},$$

(5.49)

$$Q_{20mn, 20'm'n'} = \frac{2k}{\varepsilon_m} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{mm'} \{1 - \delta_{0,1-\sigma}\} \{1 - \delta_{0,1-\sigma'}\} C_{mnmn'} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \int_0^\pi d\theta r^2(\theta) \operatorname{sen} \theta \left\{ \tau_n^m \tau_{n'}^m + m^2 \pi_n^m \pi_{n'}^m \right\} \cdot \left\{ \frac{sj_n H_{n'} - th_{n'} J_n}{r} \right\} + \right.$$

$$+\frac{e^2}{a^2}\int_0^\pi d\theta r^4(\theta)\text{sen}^3\theta \cos\theta \left\{ \text{tn}(n+1)\pi_n^m \tau_n^m - \text{sn}'(n'+1)\pi_n^m \tau_n^m \right\} \frac{j_n h_{n'}}{r},$$

(5.50)

$$Q_{1\sigma mn, 2\sigma' m' n'} = \frac{2k}{\varepsilon_m} \delta_{-\sigma\sigma'} \delta_{mm'} \left\{ 1 - \delta_{0,1-\sigma} \right\} \left\{ 1 - \delta_{0,1-\sigma'} \right\} C_{mnmn'}$$

$$\cdot \left\{ \int_0^\pi d\theta r^2(\theta) \text{sen}\theta m \left\{ \sigma' \pi_n^m \tau_n^m - \sigma \pi_n^m \tau_n^m \right\} \cdot \left\{ \frac{\rho j_n h_{n'} + p J_n H_{n'}}{r} \right\} + \right.$$

$$\left. + \frac{e^2}{a^2} \int_0^\pi d\theta r^4(\theta) \text{sen}^3\theta \cos\theta m \pi_n^m \pi_n^m \left\{ \frac{\sigma n'(n'+1) h_n J_n - \sigma' n(n+1) j_n H_{n'}}{kr^2} \right\} \right\},$$

(5.51)

$$Q_{2\sigma mn, 1\sigma' m' n'} = \frac{2k}{\varepsilon_m} \delta_{-\sigma\sigma'} \delta_{mm'} \left\{ 1 - \delta_{0,1-\sigma} \right\} \left\{ 1 - \delta_{0,1-\sigma'} \right\} C_{mnmn'}$$

$$\cdot \left\{ \int_0^\pi d\theta r^2(\theta) \text{sen}\theta m \left\{ \sigma' \pi_n^m \tau_n^m - \sigma \pi_n^m \tau_n^m \right\} \cdot \left\{ \frac{\rho' j_n h_{n'} + q J_n H_{n'}}{r} \right\} + \right.$$

$$\left. + \frac{e^2}{a^2} \int_0^\pi d\theta r^4(\theta) \text{sen}^3\theta \cos\theta m \pi_n^m \pi_n^m \left\{ \frac{\sigma n'(n'+1) h_n J_n - \sigma' n(n+1) j_n H_{n'}}{k'r^2} \right\} \right\},$$

con "e" la excentricidad del esferoide definida en la ecuación (4.3) y habiéndose considerado el diferencial de superficie en coordenadas esféricas para objetos elipsoidales dado por

$$d\vec{s} = r^2 \text{sen}\theta d\theta d\phi \left\{ \hat{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial \theta} \hat{\theta} \right\}, \quad (5.52)$$

con

$$r(\theta) = \left\{ \frac{\cos^2 \theta}{a^2} + \frac{\sin^2 \theta}{b^2} \right\}^{-1/2} . \quad (5.53)$$

Para dispersores esféricos la integración en " $\theta$ " se puede realizar explícitamente apoyados en la relación

$$\int_0^\pi \left\{ \tau_n^m \tau_{n'}^m + m^2 \pi_n^m \pi_{n'}^m \right\} \sin \theta \, d\theta = \frac{\varepsilon_m}{2\gamma_{mn}} \delta_{nn'} . \quad (5.54)$$

Se obtiene una matriz "Q" diagonal cuyos elementos no nulos son

$$Q_{10mn,10mn} = kr (j_n H_n - h_n J_n) , \quad (5.55)$$

$$Q_{20mn,20mn} = kr (sj_n H_n - th_n J_n) . \quad (5.56)$$

Así, la matriz T resulta ser diagonal con sus elementos dados por

$$T_{10mn,10mn} = - \frac{j_n(\rho') \partial_\rho (\rho j_n(\rho)) - j_n(\rho) \partial_{\rho'} (\rho' j_n(\rho'))}{j_n(\rho') \partial_\rho (\rho h_n(\rho)) - h_n(\rho) \partial_{\rho'} (\rho' j_n(\rho'))} , \quad (5.57)$$

$$T_{20mn,20mn} = - \frac{j_n(\rho) \partial_{\rho'} (\rho' j_n(\rho')) - (\rho'/\rho)^2 j_n(\rho') \partial_\rho (\rho j_n(\rho))}{h_n(\rho) \partial_{\rho'} (\rho' j_n(\rho')) - (\rho'/\rho)^2 j_n(\rho') \partial_\rho (\rho h_n(\rho))} .$$

Estas expresiones coinciden, respectivamente, con el negativo de los coeficientes "a<sub>n</sub>" y "b<sub>n</sub>" de las ecuaciones (3.8) siendo  $K=\rho'/\rho$ .

Dada una onda plana incidente sobre el dispersor, los ángulos  $\theta'$  y  $\phi'$  especifican la dirección desde la cual incide y se consideran dos posibles estados de polarización: paralela y vertical.

Utilizando las ecuaciones 5,14,15 y 16 del apéndice A se han obtenido las siguientes formas explícitas para los coeficientes asociados a la expansión de la onda plana de amplitud unitaria y polarización paralela

$$a_{10mn} = 4 i^n \sigma_m \gamma_{mn}^{1/2} \frac{P_n^m(\cos\theta')}{\text{sen}\theta'} g'_{0m}(\phi') \quad , \quad (5.59a)$$

con

$$g'_{0m}(\phi') = \begin{cases} \text{sen}(m\phi') & \sigma = -1 \\ \text{cos}(m\phi') & \sigma = 1 \end{cases} \quad , \quad (5.59b)$$

$$(5.59c)$$

$$a_{20mn} = 4 i^{n+1} \gamma_{mn}^{1/2} [ P_n^{m+1}(\cos\theta') - m \text{ctg}\theta' P_n^m(\cos\theta') ] g_{0m}(\phi') \quad .$$

En el caso de polarización vertical

$$(5.59d)$$

$$a_{10mn} = 4 i^n \gamma_{mn}^{1/2} [ P_n^{m+1}(\cos\theta') - m \text{ctg}\theta' P_n^m(\cos\theta') ] g_{0m}(\phi') \quad ,$$

$$a_{20mn} = -4 i^{n+1} \sigma_m \gamma_{mn}^{1/2} \frac{P_n^m(\cos\theta')}{\text{sen}\theta'} g_{0m}(\phi') \quad . \quad (5.59e)$$

Es así como, una vez especificada la polarización e

incidencia, calculados los coeficientes "a" mediante las ecuaciones (5.60) y habiendo sido evaluada la matriz T, se determinan los coeficientes "f" del campo dispersado haciendo uso de (5.26). El campo resultante es la suma del incidente con el dispersado y la intensidad normalizada se calcula tomando el cuadrado de la magnitud del campo.

El anterior formalismo se ha usado en el cálculo del espectro de la intensidad para dispersores esféricos y esferoidales en el régimen electrodinámico. Las figuras 5.2 y 5.3 ponen de manifiesto la excitación de multipolos superiores al dipolar y el corrimiento hacia el rojo al incrementar las dimensiones del dispersor así como una disminución de las intensidades asociadas a los picos de resonancia.

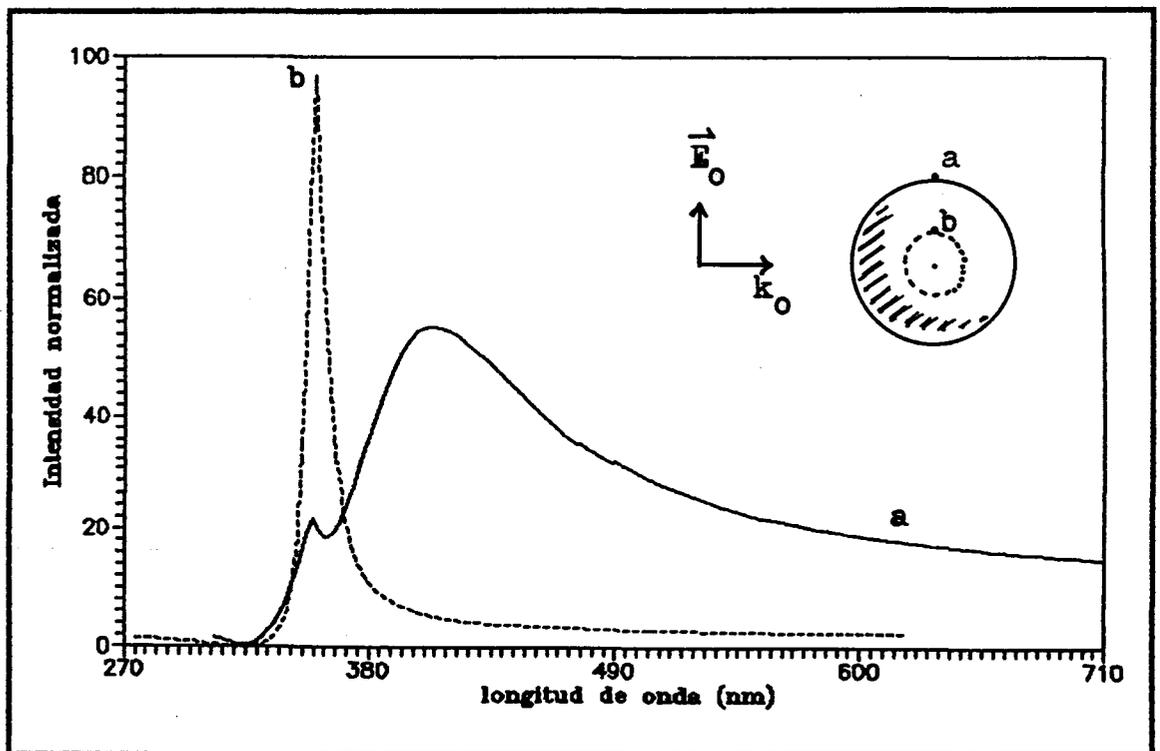


Fig. 5.2 Corrimiento hacia el rojo y disminución de la intensidad del campo electromagnético sobre la superficie del dispersor esférico de Plata, de 50 nm de radio. La curva de segmentos corresponde a un quinto del espectro de una esfera de 5 nm.

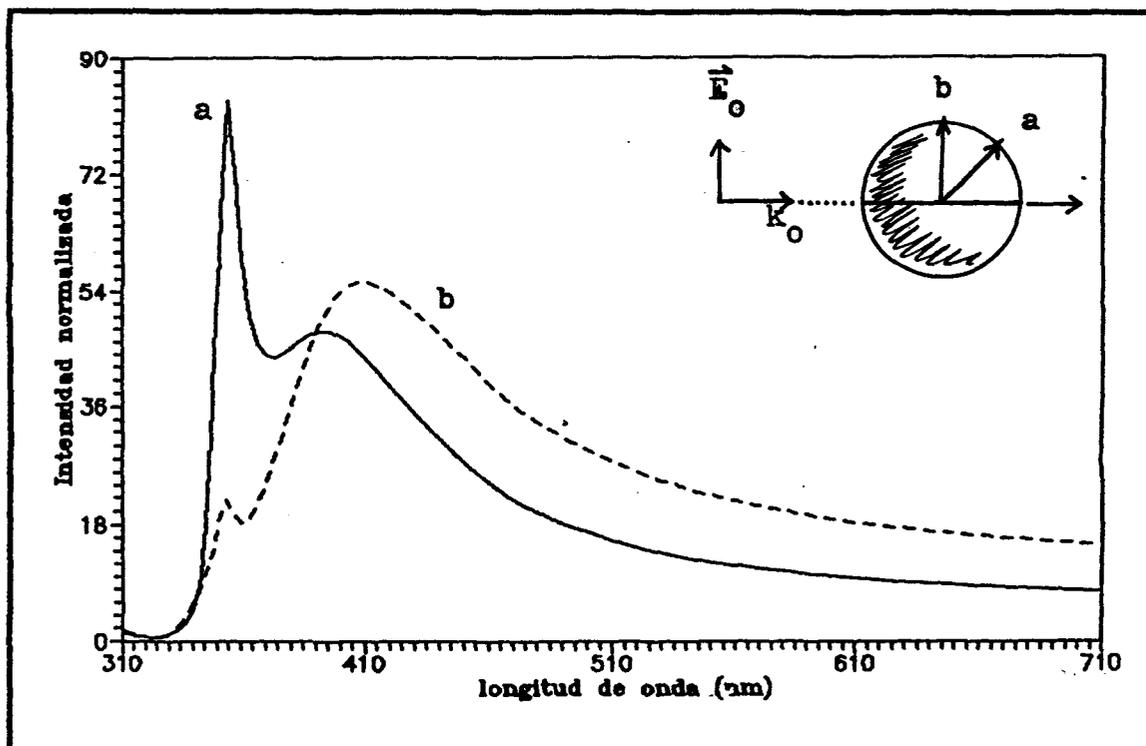


Fig. 5.3 Manifestación del modo cuadrupolar en el campo sobre la superficie de un dispersor esférico de Plata, de 50 nm de radio, observándose a  $45^\circ$  (línea continua) y a  $90^\circ$  (línea de segmentos) con respecto a la dirección con que incide.

De nuevo se debe mencionar que el formalismo de Waterman ha excluido, en las expansiones de los campos electromagnéticos, las soluciones de tipo longitudinal. En favor de tal omisión siguen siendo válidos los comentarios incluidos al final del capítulo previo. Si se quisiese incorporar las soluciones de tipo longitudinal se haría mediante generalización de las expansiones (5.20) y (5.22a). El hecho de que la solución elemental de tipo longitudinal sea derivada de una función potencial (ecuación 3.1a) permitiría incluso que el formalismo de Waterman (1979), en el caso electrostático, sirviese de guía en el proceso de generalización de la teoría de la condición de frontera extendida.

Cabe mencionar que las resonancias presentes no son enteramente atribuidas a la excitación de las oscilaciones de superficie de los electrones de conducción. Más bien son resonancias híbridas resultantes del comportamiento cooperativo tanto de los electrones de valencia (electrones d) de la plata como de los electrones de conducción (Ehrenreich H. y Philipp H.R.; 1962).

## 6. EXTENSION DEL FORMALISMO DE LA MATRIZ T A SISTEMAS DE DOS DISPERSORES.

La extensión de la teoría de Waterman a un sistema compuesto de varios dispersores fue hecha por Peterson y Ström (1973) partiendo del principio de Huygens el cual se había utilizado en la primera presentación del formalismo de matriz T para un dispersor (Waterman, 1971). En el presente caso, se han hecho uso de teoremas de conservación de flujo para presentar la estructura propia del formalismo de la matriz de transición (Waterman, 1979) y por ello hemos desarrollado consideraciones análogas para hacer la extensión a sistemas de dos dispersores, según la geometría indicada en la figura 6.1.

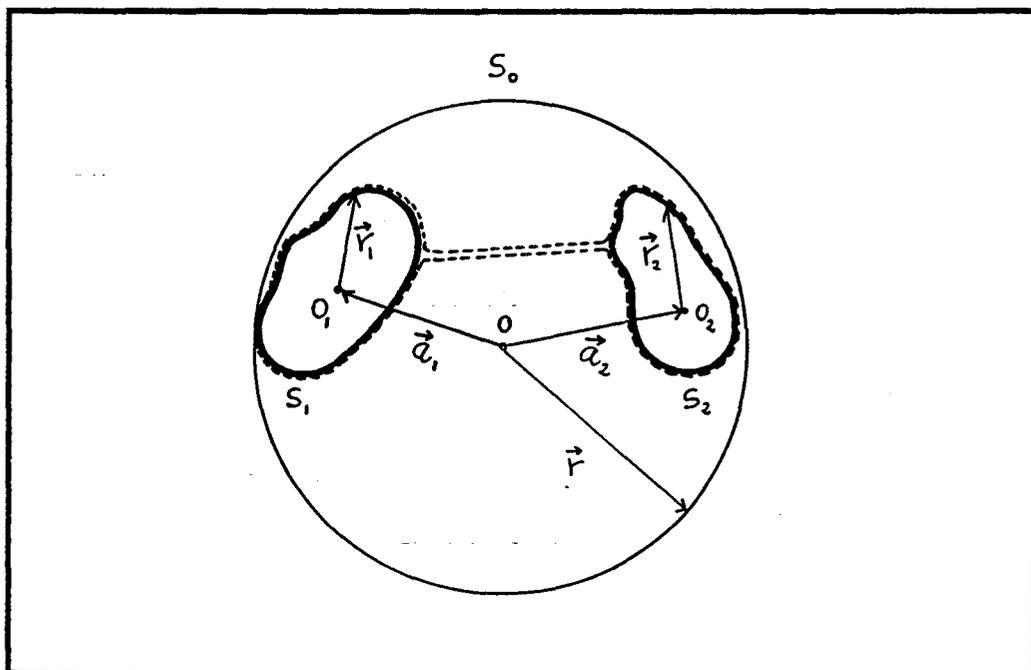


Fig. 6.1 Geometría y notación para un sistema compuesto de dos dispersores.

Para una región del espacio inscrita en una esfera de radio  $R$ , con las funciones elementales  $\vec{\Psi}_n$  y  $\text{Re}\vec{\Psi}_n$  referidas al origen "0" (centro de tal esfera) el expresar éstas funciones base respecto a otro sistema de coordenadas "0'" se realiza mediante operadores de traslación debiéndose prestar atención a la parte radial de los argumentos.

Dada  $\vec{\Psi}_n(\vec{r})$  con  $r > R$ , en términos de funciones base referidas a un sistema de coordenadas cuyo origen está fuera de la esfera de radio  $R$ , su expresión es

$$\vec{\Psi}_n(\vec{r}) = \sum_m S_{nm}(\vec{a}) \text{Re}\vec{\Psi}_m(\vec{r}') \quad , \quad (6.1a)$$

y si el origen del nuevo sistema de coordenadas está dentro de la esfera de radio  $R$ , la expresión a usar es

$$\vec{\Psi}_n(\vec{r}) = \sum_m R_{nm}(\vec{a}) \vec{\Psi}_m(\vec{r}') \quad , \quad (6.1b)$$

donde "S" es el operador de traslación que depende de las coordenadas esféricas  $(a, \eta, \psi)$  que definen al vector  $\vec{a}$  el cual especifica la posición del nuevo sistema de coordenadas respecto al original. Las formas explícitas de la matriz  $S$  se han tomado de Peterson y Ström (1973); la matriz  $R$  corresponde a sustituir las funciones de Hankel por las de Bessel en las expresiones de la matriz  $S$ . Una propiedad a utilizar de la matriz de traslación es

$$S'(\vec{a}) = S(-\vec{a}) \quad . \quad (6.2)$$

En forma análoga, según los criterios expuestos, se puede realizar la traslación de las funciones regulares  $\text{Re}\vec{\Psi}_n$

$$\text{Re}\vec{\Psi}_n(\vec{r}) = \sum_m R_{nm}(\vec{a}) \text{Re}\vec{\Psi}_m(\vec{r}') \quad (6.3)$$

Considérese una extensión de las ecuaciones (5.17) tomando como origen principal, en la geometría de la figura 6.1, el punto  $O_1$  y aplicando el teorema (5.16) integrando en  $S_0$  y en la superficie plegada a los dispersores (no existiendo singularidades en el espacio entre estos), con  $\vec{F} = \vec{\Psi}_n$  :

$$\sum_{k=1}^2 \int_{S_k} ds [(\vec{\nabla}_x \vec{\Psi}_n) \cdot (\hat{n} x \vec{E})_k + i\omega\mu \vec{\Psi}_n \cdot (\hat{n} x \vec{H})_k] = \int_{S_0} ds [(\vec{\nabla}_x \vec{\Psi}_n) \cdot (\hat{n} x \vec{E}) + i\omega\mu \vec{\Psi}_n \cdot (\hat{n} x \vec{H})] \quad (6.4)$$

donde

$$(\hat{n} x \vec{E})_k = \sum_n \alpha_n^{(k)} \hat{n} x \text{Re}\vec{\Psi}'_n(\vec{r}_k) \quad (6.5a)$$

$$i\omega\mu (\hat{n} x \vec{H})_k = \sum_n \alpha_n^{(k)} \hat{n} x \vec{\nabla} x \vec{\Psi}'_n(\vec{r}_k) \quad (6.5b)$$

y  $\vec{E} = \vec{E}^{inc} + \vec{E}^{disp}$ ; estando los campos dados por las ecuaciones (5.14) y (5.15). Aplicando el operador de traslación las funciones  $\vec{\Psi}_n$  en la integral sobre la superficie  $S_2$  se expresan como

$$\vec{\Psi}_n = \sum_m S_{nm}(-\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \text{Re}\vec{\Psi}_m \quad (6.6a)$$

y la integral sobre  $S_o$ , en procura de evaluarla respecto a un origen en "0", requiere que las funciones elementales  $\Psi_n$  sean referidas a este origen, esto es

$$\Psi_n = \sum_{nm} R_{nm}(-\vec{a}_1) \Psi_m(\vec{r}) \quad . \quad (6.6b)$$

Así, sustituyendo en (6.4) se obtiene

$$\begin{aligned} & \int_{S_1} ds \left\{ [\vec{\nabla}_x \Psi_n(\vec{r}_1)] \cdot \sum_{n'} \alpha_{n'}^{(1)} [\hat{n}_x \text{Re} \Psi_{n'}(\vec{r}_1)] + \right. \\ & \quad \left. + \Psi_n(\vec{r}_1) \cdot \sum_{n'} \alpha_{n'}^{(1)} [\hat{n}_x \vec{\nabla}_x \text{Re} \Psi_{n'}(\vec{r}_1)] \right\} + \\ & + \int_{S_2} ds \left\{ [\vec{\nabla}_x \sum_{nm} S_{nm}(-\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \text{Re} \Psi_m(\vec{r}_2)] \cdot \sum_{n'} \alpha_{n'}^{(2)} [\hat{n}_x \text{Re} \Psi_{n'}(\vec{r}_2)] + \right. \\ & \quad \left. + \sum_{nm} S_{nm}(-\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \text{Re} \Psi_m(\vec{r}_2) \cdot \sum_{n'} \alpha_{n'}^{(2)} [\hat{n}_x \vec{\nabla}_x \text{Re} \Psi_{n'}(\vec{r}_2)] \right\} = \\ & \int_{S_o} d\vec{s} \cdot \left\{ \left[ \vec{\nabla}_x \sum_m R_{nm}(-\vec{a}_1) \Psi_m(\vec{r}) \right] \times \sum_n a_n \text{Re} \Psi_n(\vec{r}) + \right. \\ & \quad \left. + \sum_m R_{nm}(-\vec{a}_1) \Psi_m(\vec{r}) \right\} \times \left[ \vec{\nabla}_x \sum_n a_n \text{Re} \Psi_n(\vec{r}) \right] \quad , \end{aligned}$$

de donde surge, usando para la matriz  $R$  el equivalente a la relación (6.2), y la definición de la matriz  $Q$  dada en (5.28)

$$Q'_1 \alpha^{(1)} + S(-\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \operatorname{Re} Q'_2 \alpha^{(2)} = R'(\vec{a}_1) a \quad (6.7a)$$

En forma semejante, si se toma como origen principal el punto " $O_2$ " se obtiene

$$S(-\vec{a}_2 + \vec{a}_1) \operatorname{Re} Q'_1 \alpha^{(1)} + Q'_2 \alpha^{(2)} = R'(\vec{a}_2) a \quad (6.7b)$$

Al considerar como origen principal el punto "0", y tomando el teorema de conservación de flujo (5.16) con  $\vec{F} = \operatorname{Re} \vec{\Psi}_n$  se obtiene una tercera ecuación

$$- R(\vec{a}_1) \operatorname{Re} Q'_1 \alpha^{(1)} - R(\vec{a}_2) \operatorname{Re} Q'_2 \alpha^{(2)} = f \quad (6.7c)$$

Se han obtenido dos conjuntos de constantes intermedias  $\alpha^{(1)}$  y  $\alpha^{(2)}$ ; correspondientemente dos ecuaciones, (6.7a) y (6.7b). Así, al calcular para éstas constantes y utilizando (6.7c) se obtiene la matriz  $T_{12}$  efectiva del sistema (Cruz L., 1989)

(6.8)

$$T_{12} = R_1 \left\{ T_1 [1 - S_{12} T_2 S_{21} T_1]^{-1} [1 + S_{12} T_2 R_{21}] \right\} R'_1 + \\ + R_2 \left\{ T_2 [1 - S_{21} T_1 S_{12} T_2]^{-1} [1 + S_{21} T_1 R_{12}] \right\} R'_2 ,$$

donde  $R_i = R(\vec{a}_i)$ ,  $S_{ij} = S(-\vec{a}_i + \vec{a}_j)$  con  $i \neq j$ ,  $i, j = 1, 2$  y  $T_1, T_2$  las matrices de transición asociadas a cada dispersor.

La ecuación (6.8) es la base para el estudio de la dispersión por parte de sistemas de dos partículas. Se ha aplicado en primera instancia a aquellos cuyo campo dispersado posee simetría axial respecto a la dirección del campo incidente.

## 7. INTENSIFICACION POR PARTE DE SISTEMAS DE DOS DISPERSORES ESFEROIDALES CON SIMETRIA AXIAL.

A partir de la relación (6.8) y las formas explícitas de la matriz de traslación incluidas en el apéndice B, se han evaluado espectros de dispersión para sistemas cuyo campo dispersado posee simetría axial referida a la dirección de incidencia.

En primera instancia con dispersores esféricos, para el sistema mostrado en la figura 7.1, el espectro obtenido muestra dos picos en contraste con uno que se tendría para una esfera aislada. Este mismo sistema, con idénticas condiciones de polarización y punto de observación, ha sido analizado por Liver, Nitzan y Gersten (1984) habiéndose usado un formalismo electrostático. Los resultados dados por la teoría de matriz T son semejantes a los reportados en la citada referencia, según se indica en la figura 7.2. La coincidencia en la posición de las resonancias fue verificada así como el orden de magnitud de la intensidad de los picos.

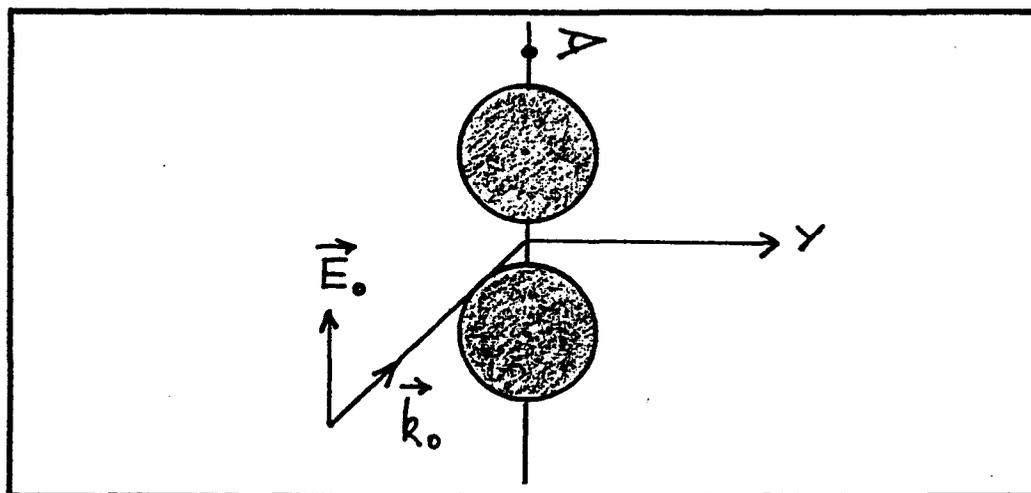


Fig. 7.1 Sistema dispersor de dos esferas de plata de 5,0 nm cada una; con una distancia mínima de separación de 1 nm incidiendo radiación por el eje X y observándose a una distancia de 11,0 nm sobre el eje Z.

Un estudio sistemático de éste sistema, variando la separación entre las esferas, se incluye en la referencia de Cruz, Fonseca y Gómez (1989). Ellos muestran la existencia de una distancia crítica (aquella para la cual la intensidad del pico principal es mayor que la respectiva intensidad del sistema con esferas en contacto) que se atribuye a una complicada dependencia de las contribuciones multipolares con las coordenadas angulares. Así, la gran anisotropía del campo resultante de la superposición de los campos asociados a cada dispersor (tomada en cuenta su interacción mutua); apunta a considerar la posibilidad de que la intensidad tenga un máximo para cierta distancia de separación entre las partículas mayor que aquella existente cuando están en contacto, expectativa corroborada en los cálculos computacionales hechos por los mencionados autores.

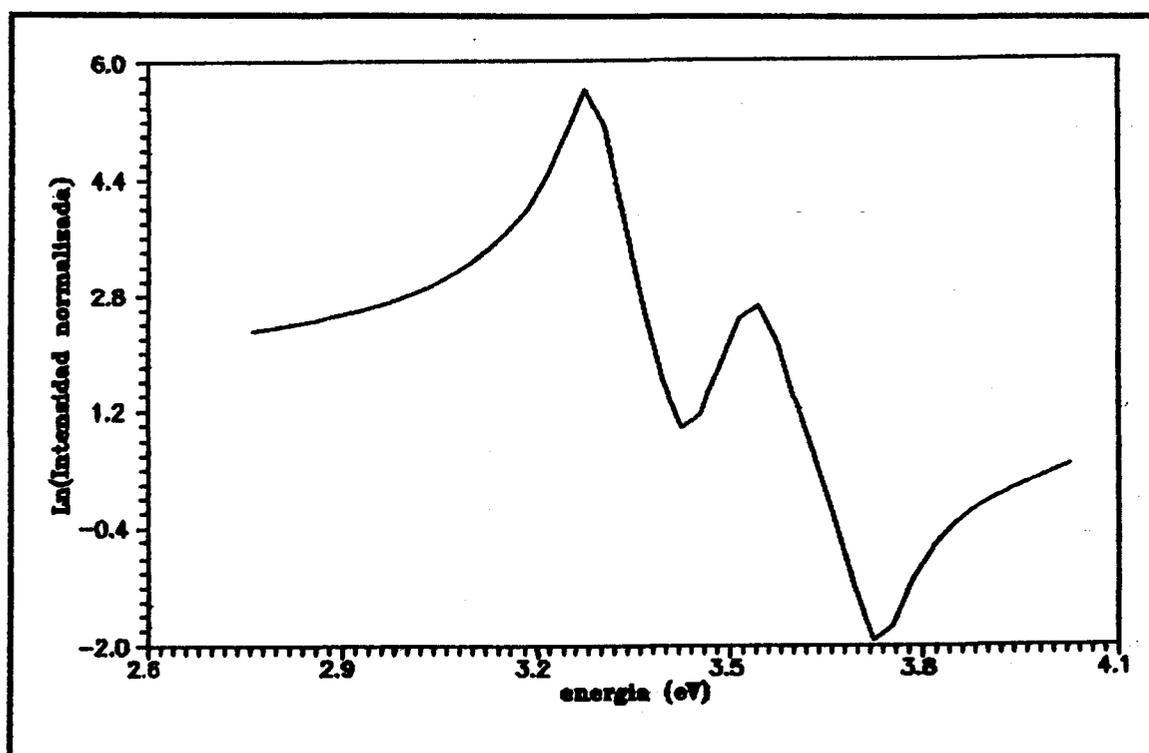


Fig. 7.2 Espectro de un sistema de dos esferas de plata ligeramente separadas observándose en el eje axial, a 0.5 nm de la superficie de una de las esferas.

También se ha estimado, en la referencia previamente mencionada, una distancia de desacoplamiento del orden de  $4 \cdot a$  siendo "a" una longitud característica del sistema (radio de la esfera en el caso discutido).

Para una excentricidad no nula en las partículas que conforman el sistema, esto es una pareja de esferoides, se muestra en la figura 7.3 un comportamiento semejante al exhibido por dispersores aislados: un incremento de la intensidad y un corrimiento hacia el rojo aunque se presentan dos picos de resonancia. La figura 7.4 pone de manifiesto que la orientación relativa de los dispersores influye en el grado de intensificación y la posición de los picos. El estudio sistemático que hemos emprendido, variando la orientación relativa de las partículas se incluye en las siguientes secciones.

Para un sistema dispersor como el mostrado en la figura 7.3 se han realizado cálculos variando la separación centro a centro entre los esferoides. Se ha considerado como dirección de propagación del frente de onda plana incidente el eje Z. La polarización del campo eléctrico es paralela a la distancia entre partículas, esto es el eje X. De la información obtenida para otras direcciones de incidencia y polarizaciones se evidenció que son los anteriores parámetros los que brindan una mayor intensificación del campo, del orden de  $10^3$ .

Todas las configuraciones, al variar la distancia entre partículas, muestran dos picos de resonancia. Tal comportamiento es debido a las interacciones multipolares entre partículas, pues solamente un pico es observado cuando

los esferoides se encuentran bastante apartados. El corrimiento hacia el rojo se manifiesta al disminuir la separación entre partículas, siendo más pronunciado para el pico de mayor amplitud, el de menor energía. Este comportamiento se atribuye al corto alcance de los términos multipolares de orden superior al dipolar. Al disminuir la distancia entre partículas estos multipolos adquieren importancia corriendo el pico rápidamente en energía e incrementando su intensidad. Al aumentar la distancia de separación entre esferoides el pico de mayor energía desaparece y el de menor energía se corre hacia la longitud de onda resonante correspondiente a un esferoide aislado, esto es ya para separaciones mayores a " $4 \cdot b$ " con " $b$ " como semieje mayor del esferoide.

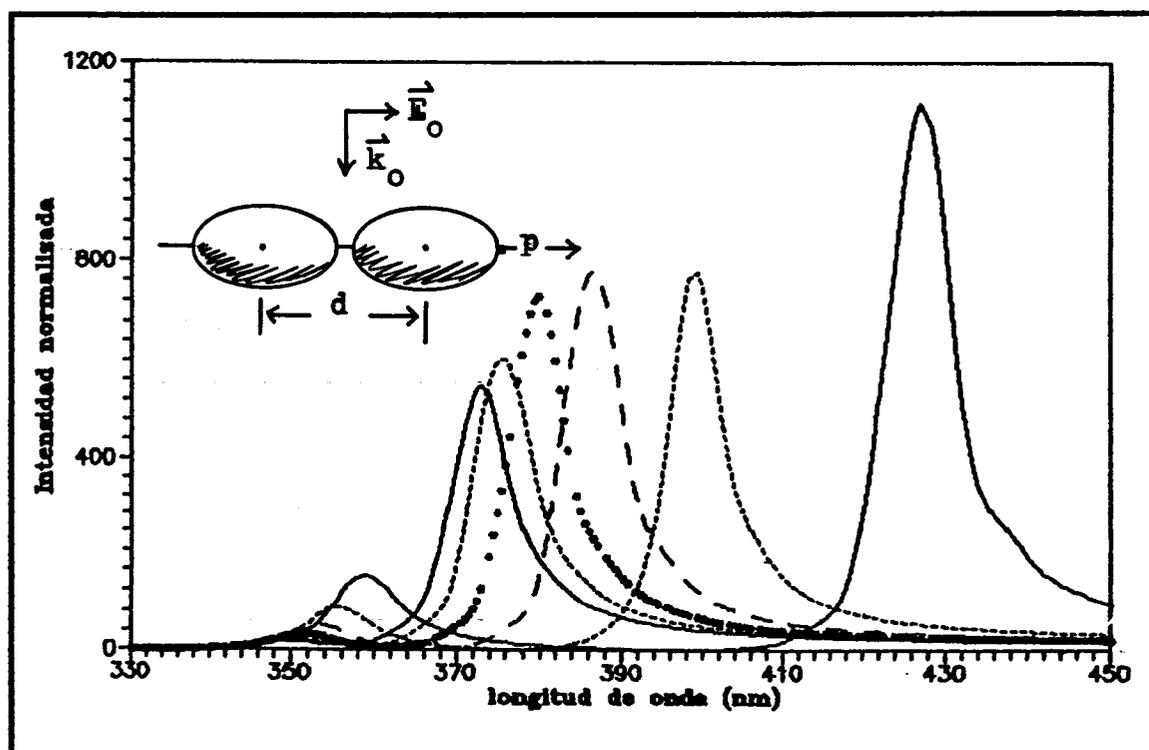


Fig. 7.3 Espectro calculado para un sistema de dos esferoides de plata cuyos semiejes son  $a=5,0$  nm;  $b=5,556$  nm, separados por una distancia variable, alineados con sus semiejes mayores sobre el eje X. El pico de mayor amplitud corresponde al sistema de esferoides en contacto mutuo. Los restantes picos corridos hacia el azul, y con intensidades decrecientes, corresponden a distancias de separación crecientes.

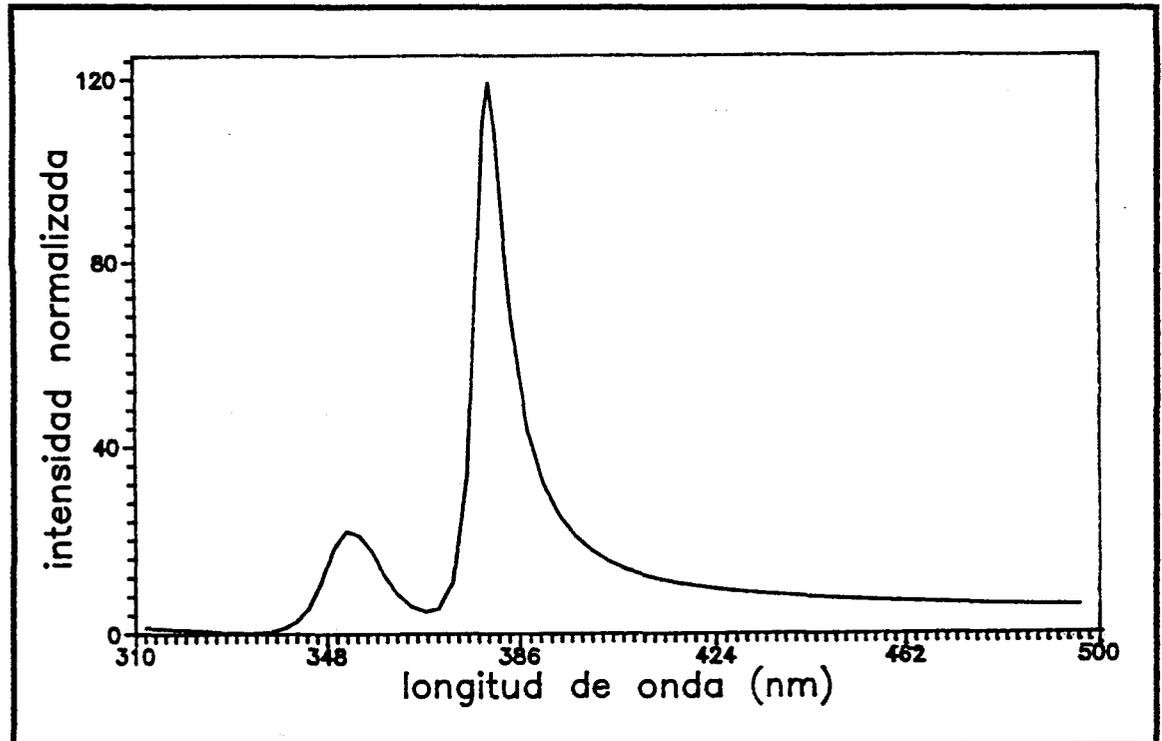


Fig. 7.4 Espectro de un sistema de dos esferoides de plata de semiejes  $a=5,0$  nm;  $b=5,556$  nm; desplazados en el eje  $X$  y con sus semiejes mayores paralelos al eje  $Z$ , incidiendo la radiación por el eje  $Z$  polarizada en  $X$ .

A partir de la posición de los picos, se ha encontrado que la interacción entre esferoides es de tipo exponencial, de la forma

$$\lambda(d) = \lambda_{\infty} + (\lambda_0 - \lambda_{\infty}) \cdot e^{-\eta^{-1} \cdot (d-d_0)} \quad , \quad (7.1)$$

donde " $d_0$ " es la separación mínima entre centros de esferoides (al estar en contacto),  $\lambda_0$  es la posición del pico para el sistema de esferoides tocándose,  $\lambda_{\infty}$  la posición del pico de baja energía cuando la separación entre los esferoides es tal que su interacción es nula. El parámetro

" $\eta$ " determina la rapidez del corrimiento hacia el rojo. La tabla 7.1 muestra los valores numéricos obtenidos para cada uno de los picos de resonancia en función de la distancia entre partículas del sistema. El no incluir el dato correspondiente a  $\lambda_2$  para la máxima separación se debe a que en éste caso la resonancia no está presente.

d(nm)	$\lambda_1$ (nm)	$\lambda_2$ (nm)
11,112	427,62	358,62
11,362	398,75	355,54
11,612	386,81	353,71
11,862	381,10	351,31
12,112	375,56	350,71
12,362	372,85	350,12
22,222	361,55	-----

Tabla 7.1 Longitudes de onda de resonancia de los dos picos presentes en el espectro de dos esferoides prolatos con sus semiejes mayores alineados en X y separados por una distancia d incidiendo luz por el eje Z observando en la punta del sistema (conjunto de la figura 7.3).

Las curvas de ajuste obtenidas se describen, para cada uno de los picos, por:

$$\lambda_1(d) = 361,55 + (427,62 - 361,55) e^{-\frac{d-11,112}{0,571}} \text{ nm} \quad , \quad (7.2)$$

$$\lambda_2(d) = 350,12 + (358,62 - 350,12) e^{-\frac{d-11,112}{0,470}} \text{ nm} \quad . \quad (7.3)$$

La figura 7.5 resume la información contenida en la tabla 7.1 y en las ecuaciones (7.2) y (7.3).

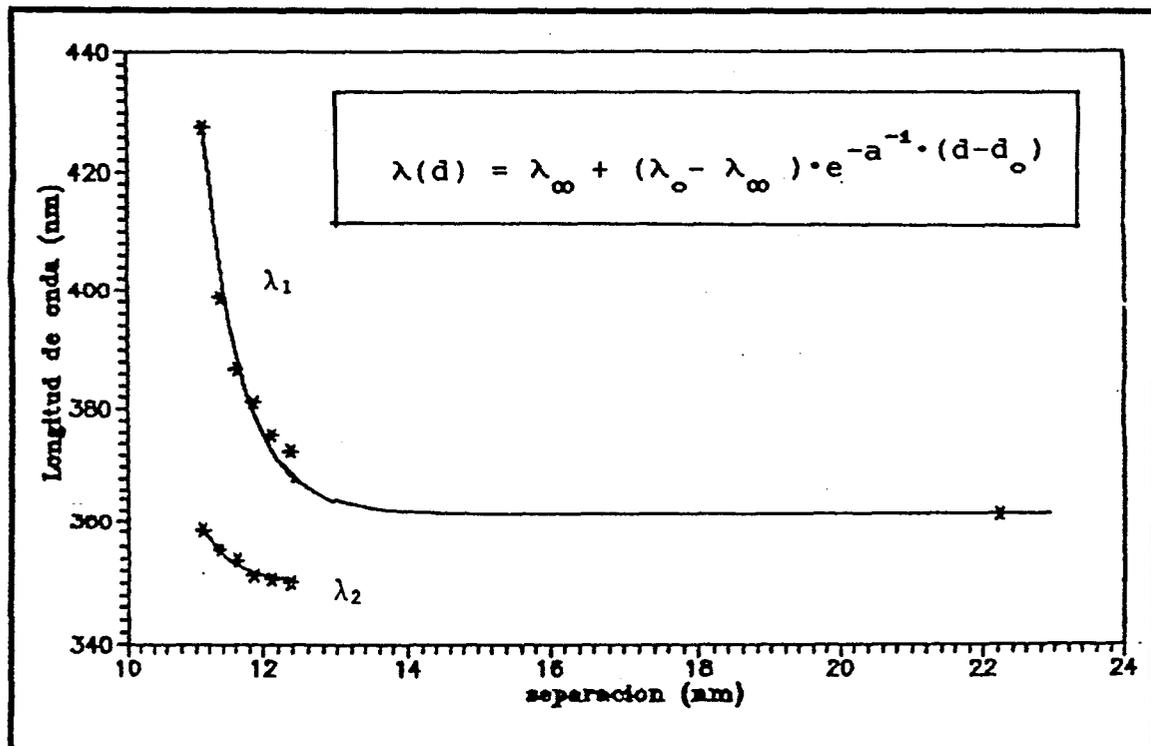


Fig. 7.5 Curvas de regresión que describen el comportamiento exponencial de la longitud de onda de las resonancias del sistema mostrado en la figura 7.3, para diferentes valores de la distancia de separación entre esferoides.

En los cálculos realizados las expansiones de los campos se han hecho hasta  $n=5$ , lo cual traducido al conjunto de índices " $\tau\sigma mn$ " implica matrices de transición cuya dimensión es 70; estando para un  $n$  dado la dimensión de la matriz  $T$  dada por  $2 \cdot n \cdot (2+n)$ .

Se debe indicar que para un sistema dispersor de dos partículas "en contacto" se requiere incrementar a 7 el índice  $n$  (dimensión respectiva de 126) para asegurar la estabilidad numérica de la matriz  $T$ . En este sentido las curvas de regresión deben ser consideradas como resultados aproximados en los que se pretende resumir la regularidad observada.

## 8. FORMALISMO DE SECCIONES EFICACES Y LA MATRIZ T.

Incluiremos en este capítulo la extensión de la teoría de la matriz de transición hacia el formalismo de secciones eficaces. Ello servirá de base en futuros estudios para el cálculo de campos en la zona radiativa, a la vez de inmediato ilustra aún más el potencial de la teoría de matriz T.

Al incidir una onda plana sobre un dispersor es, en general, dispersada y absorbida parcialmente. La magnitud en que se dan éstos procesos depende de la forma y orientación del dispersor, del estado de polarización y frecuencia de la luz incidente y de la constitución misma del medio material, la cual se refleja en el comportamiento de la función dieléctrica con la frecuencia.

El conocimiento de la intensidad del campo en un punto de observación específico es importante en la interpretación de los efectos que éste tendrá sobre algún otro sistema físico ubicado en las cercanías del punto. Ejemplo de particular interés lo constituye la explicación de la inesperada intensidad del espectro Raman producido por moléculas de piridina ubicadas cerca de superficies metálicas de plata.

En la zona radiativa los parámetros físicos que brindan información sobre la magnitud de los procesos de dispersión y absorción son las llamadas secciones eficaces cuyas definiciones implican considerar los campos electromagnéticos en puntos de observación cuya distancia de separación con el dispersor es mucho mayor que la longitud de onda de la luz incidente.

En primera instancia se define la sección eficaz de extinción o sección total como la razón entre la potencia por unidad de superficie de la radiación que se atribuye a la presencia del

dispersos y la potencia de la radiación incidente. De las ecuaciones (A.26) para las soluciones elementales en la zona radiativa, el campo dispersado se expresa como

$$\vec{E}^{disp} = \frac{e^{ikr}}{r} \cdot \left\{ \frac{\vec{S}(\hat{k}, \hat{k}_i)}{ik} \right\}, \quad (8.1)$$

con

$$\vec{S}(\hat{k}, \hat{k}_i) = \sum_{\tau\sigma mn} \vec{a}_{\tau\sigma mn}^* (\theta, \phi) f_{\tau\sigma mn}(\alpha, \beta), \quad (8.2)$$

siendo  $(\theta, \phi)$  las coordenadas angulares del punto de observación,  $(\alpha, \beta)$  especifican la dirección de incidencia  $\hat{k}_i$ . Se ha considerado además que en la zona radiativa  $\hat{r} \rightarrow \hat{k}$ . Para la situación física representada en la figura 8.1 el campo resultante se expresa por

$$\vec{E} = \left\{ \hat{e}_o + \frac{\vec{S}(\hat{k}, \hat{k}_i)}{ikl} \cdot e^{ik\rho^2/2l} \right\} \cdot e^{ikl}, \quad (8.3)$$

habiéndose usado la suposición de que  $l \gg \rho$  para aproximar la magnitud del vector  $\vec{r}$ .

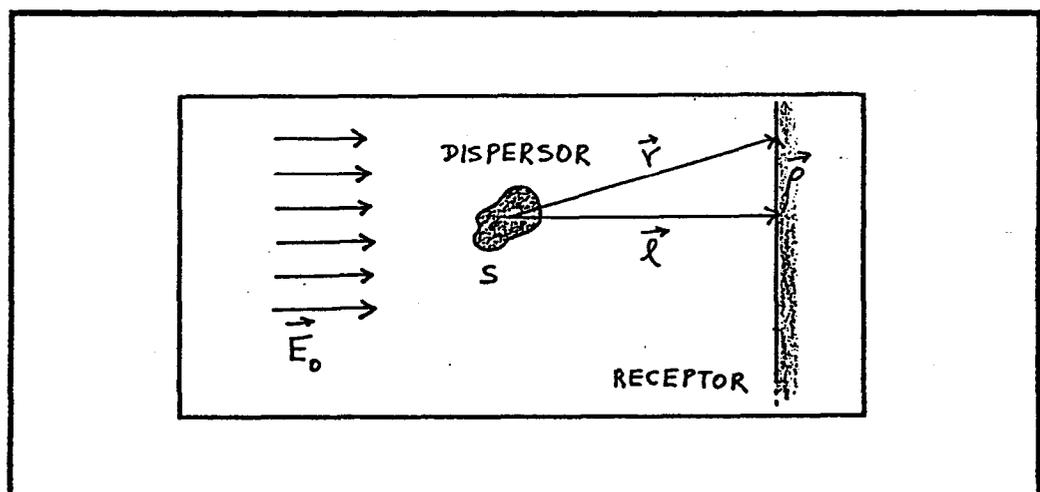


Fig. 8.1 Incidencia del campo resultante sobre el receptor dándose una extinción debido a la presencia del dispersor.

La intensidad del campo resultante es

$$|E|^2 = 1 + 2 \hat{e}_o \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\vec{S}(\hat{k}, \hat{k}_i)}{ikl} e^{ik\rho^2/2l} \right\} \quad , \quad (8.4)$$

ecuación en la cual se ha despreciado un término que decrece con el cuadrado de "kl".

La intensidad que se percibe en el receptor es diferente a quella existente en ausencia del dispersor, por lo tanto

$$\sigma_{\text{ext}} = \int da \left\{ 2 \hat{e}_o \cdot \text{Re} \left[ \frac{\vec{S}}{ikl} e^{ik\rho^2/2l} \right] \right\} \quad , \quad (8.5)$$

donde "Re" significa parte real del término entre paréntesis y realizándose la integración sobre el área expuesta del receptor. Luego, si las dimensiones de éste son pequeñas en relación con su separación al dispersor,

$$\sigma_{\text{ext}} = 2 \hat{e}_o \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\vec{S}(\hat{k}_i, \hat{k}_i)}{ikl} \int da e^{ik\rho^2/2l} \right\} \quad , \quad (8.6)$$

$$\sigma_{\text{ext}} = 2 \vec{e}_o \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\vec{S}(\hat{k}_i, \hat{k}_i)}{-ikl} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx^2/2l} \right]^2 \right\} \quad , \quad (8.7)$$

donde en la integral de Fresnel presente en (8.7) se han extendido los límites de integración hacia infinito atendiendo al hecho de que la integral misma no se ve grandemente variada y de que el campo dispersado decae con el cuadrado de "kr". Van de Hulst (1957) reporta el valor de la integral en (8.7) con lo cual se obtiene:

$$\sigma_{\text{ext}} = - \frac{4\pi}{k^2} \hat{e}_o \cdot \text{Re } \vec{S}(\hat{k}_i, \hat{k}_i) \quad , \quad (8.8)$$

ecuación que usando (8.2), (5.26) y (A.14) se expresa como

$$\sigma_{\text{ext}} = - \frac{16\pi}{k^2} \hat{e}_o \cdot \vec{a}'^*(\hat{k}_i) \text{Re } T \vec{a}(\hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o \quad . \quad (8.9)$$

Para definir la sección eficaz de dispersión  $\sigma_{\text{disp}}$  conviene escribir el campo dispersado como

$$\vec{E}^{\text{disp}} = \frac{e^{ikr}}{ikr} F(\hat{k}, \hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o \quad , \quad (8.10)$$

con

$$F(\hat{k}, \hat{k}_i) = \frac{4}{ik} \vec{a}'^*(\hat{k}) T \vec{a}(\hat{k}_i) \quad (8.11)$$

como la "diada amplitud" independiente del estado de polarización de la luz incidente. Se define

$$\sigma_{\text{disp}} = \int d\Omega |F(\hat{k}, \hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o|^2 \quad , \quad (8.12)$$

con  $d\Omega$  como diferencial de ángulo sólido. Así

$$(8.13)$$

$$\sigma_{\text{disp}} = \frac{16}{k^2} \hat{e}_o \cdot \vec{a}'^*(\hat{k}_i) T'^* \left\{ \int d\Omega \vec{a}'^*(\hat{k}) \cdot \vec{a}(\hat{k}) \right\} T \vec{a}(\hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o \quad .$$

Utilizando la definición del vector  $\vec{a}_{\tau\sigma mn}$  dada en (A.15) y la relación de ortogonalidad (A.10) junto con la ecuación (5.55) se obtiene

$$\int d\Omega \vec{a}_{\tau\sigma mn}(\hat{k}) \cdot \vec{a}_{\tau'\sigma'm'n'}(\hat{k}) = \pi \delta_{\tau\tau'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \quad , \quad (8.14)$$

con lo cual la sección de dispersión resulta ser

$$\sigma_{disp} = \frac{16\pi}{k^2} \hat{e}_o \cdot \vec{a}'^*(\hat{k}_i) T'^* T \vec{a}(\hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o \quad . \quad (8.15)$$

Por conservación de energía, la sección de absorción  $\sigma_{abs}$  sumada a la de dispersión es la sección de extinción. Por tanto

$$\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{disp} \quad (8.16)$$

y en forma explícita

$$\sigma_{abs} = -\frac{16\pi}{k^2} \hat{e}_o \cdot \vec{a}'^*(\hat{k}_i) \left\{ \text{Re } T + T'^* T \right\} \vec{a}(\hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o \quad . \quad (8.17)$$

Finalmente, se define la sección diferencial de dispersión como aquel parámetro que es proporcional a la energía del haz dispersado asociada a la componente cuya polarización coincide con la del haz incidente:

$$\sigma_{\text{dif}} = \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi r^2 | \hat{e}_o \cdot \vec{E}^{\text{disp}} |^2 \quad (8.18)$$

Así

$$\sigma_{\text{dif}} = \frac{64\pi}{k^2} | \hat{e}_o \cdot \vec{a}'^*(\hat{k}) \mp \vec{a}(\hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o |^2 \quad (8.19)$$

Casos particulares de la ecuación (8.19) son aquellos en los que la dirección de observación, especificada mediante  $\hat{k}$  es opuesta a la de incidencia o coincidente con ésta. Así, la sección eficaz de radar y la sección eficaz frontal son dadas por:

$$\sigma_{\text{rad}} = \frac{64\pi}{k^2} | \hat{e}_o \cdot \vec{a}'(\hat{k}_i) \mp \vec{a}(\hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o |^2 \quad (8.20)$$

$$\sigma_{\text{frt}} = \frac{64\pi}{k^2} | \hat{e}_o \cdot \vec{a}'^*(\hat{k}_i) \mp \vec{a}(\hat{k}_i) \cdot \hat{e}_o |^2 \quad (8.21)$$

donde se ha utilizado la identidad

$$\vec{a}(-\hat{k}) = \vec{a}'^*(\hat{k}) \quad (8.22)$$

En la próxima sección se prosigue con el estudio de la dispersión por parte de sistemas de dos dispersores esferoidales, mediante el cálculo de campos cercanos.

### 9. ROTACION DE LA MATRIZ DE TRANSICION Y SISTEMAS DE DOS DISPERSORES ESFEROIDALES EN EL LIMITE ELECTROSTATICO.

Con objeto de estudiar la resonancia e intensificación por parte de sistemas de dos dispersores esferoidales idénticos girados respecto al eje Z y desplazados sobre el eje X, se requiere, antes de establecer la matriz T total, determinar las matrices asociadas a cada dispersor. Si es del caso se aplica un operador de rotación de modo que, dada la matriz T de un dispersor cuyo semieje mayor es paralelo al eje Z, se obtenga la matriz T del mismo objeto con su semieje mayor haciendo un ángulo  $\beta$  con el eje Z.

Al considerar la rotación infinitesimal  $\theta$  de un sistema de coordenadas respecto a otro, ésta se describe mediante el operador

$$G(\theta, \hat{n}) = e^{i\theta \hat{n} \cdot \vec{L}} \quad , \quad (9.1)$$

siendo  $\vec{L} = -i\vec{r} \times \vec{\nabla}$  el operador de momentum angular y  $\hat{n}$  un vector unitario cuya dirección coincide con el eje de rotación. Si la rotación se describe mediante los ángulos de Euler la forma que adopta el operador de rotación es la siguiente

$$G(\alpha, \beta, \gamma) = e^{i\gamma L_z} e^{i\beta L_y} e^{i\alpha L_z} \quad , \quad (9.2)$$

donde el primer exponencial (de derecha a izquierda) define una primera rotación " $\alpha$ " alrededor del eje Z para obtener el sistema primado; el segundo exponencial supone un giro " $\beta$ " alrededor del eje Y' para obtener el sistema doble primado y finalmente una tercera rotación " $\gamma$ " respecto al eje Z''.

Los operadores de rotación de cada giro particular se transforman respecto al sistema de coordenadas previo, por

las expresiones:

$$e^{i\beta L_{y'}} = e^{i\alpha L_z} e^{i\beta L_y} e^{-i\alpha L_z} \quad , \quad (9.3)$$

$$e^{i\gamma L_{z'}} = e^{i\beta L_{y'}} e^{i\gamma L_{z'}} e^{-i\beta L_{y'}} \quad , \quad (9.4)$$

que al ser insertadas en (9.2) permiten expresar al operador de rotación en la forma

$$G(\alpha, \beta, \gamma) = e^{i\alpha L_z} e^{i\beta L_y} e^{i\gamma L_{z'}} \quad . \quad (9.5)$$

Haciendo uso del formalismo para tratar el momentum angular en mecánica cuántica cuando tal operador se aplica a los esféricos armónicos, el giro realizado supone variar la proyección sobre el eje Z del "momentum angular asociado". Ello implica que  $Y_{mn}(\theta, \phi)$  ha de satisfacer

$$G(\alpha, \beta, \gamma) Y_{mn}(\theta, \phi) = Y_{mn}(\theta', \phi') \quad , \quad (9.6)$$

o usando corchetes,

$$Y_{mn}(\theta', \phi') = \sum_{m'=-n}^n Y_{m'n}(\theta, \phi) \langle nm' | G(\alpha, \beta, \gamma) | nm \rangle \quad (9.7)$$

y

$$\langle \theta', \phi' | nm \rangle = \sum_{m'=-n}^n \langle \theta, \phi | nm' \rangle \langle nm' | G(\alpha, \beta, \gamma) | nm \rangle \quad , \quad (9.8)$$

expresión que, utilizando la relación (9.5), conduce a

$$Y_{mn}(\theta', \phi') = \sum_{m'=-n}^n Y_{m'n}(\theta, \phi) e^{im'\alpha} d_{m'm}^{(n)}(\beta) e^{im\gamma} \quad , \quad (9.9)$$

donde

$$d_{m'm}^{(n)}(\beta) = \langle nm' | e^{i\beta L_y} | nm \rangle \quad (9.10)$$

y

$$G_{m'm}^{(n)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{im'\alpha} d_{m'm}^{(n)}(\beta) e^{im\gamma} \quad . \quad (9.11)$$

Para establecer la forma explícita de los elementos matriciales  $d_{m'm}^{(n)}$  se recurre a la base asociada a la representación espinorial normalizada de los autofunciones  $\langle \theta, \phi | nm \rangle$ :

$$\langle \theta, \phi | nm \rangle = \frac{\chi_+^{n+m} \chi_-^{n-m}}{\{(n+m)!(n-m)!\}^{1/2}} \quad , \quad (9.12)$$

con  $\chi_+ = |1/2, 1/2\rangle$  y  $\chi_- = |1/2, -1/2\rangle$  que satisfacen:

$$L_z \chi_+^p \chi_-^q = \frac{1}{2}(p-q) \chi_+^p \chi_-^q \quad , \quad (9.13)$$

$$L^2 \chi_+^p \chi_-^q = \left\{ \frac{p+q}{2} \right\} \left\{ \frac{p+q}{2} + 1 \right\} \chi_+^p \chi_-^q \quad , \quad (9.14)$$

lo cual asegura congruencia con las conocidas relaciones:

$$\langle \theta, \phi | L_z | nm \rangle = m \langle \theta, \phi | nm \rangle \quad , \quad (9.15)$$

$$\langle \theta, \phi | L^2 | nm \rangle = n(n+1) \langle \theta, \phi | nm \rangle \quad . \quad (9.16)$$

Así, de la ecuación (9.9), haciendo uso de (9.12) en el sistema girado, dado que para la rotación particular  $\alpha=0$ ,  $\gamma=0$  la matriz "d" coincide con "G",

$$(9.17)$$

$$\frac{(\chi_+)'^{n+m} (\chi_-)'^{n-m}}{\{(n+m)! (n-m)!\}^{1/2}} = \sum_{m'=-n}^n \frac{\chi_+^{n+m'} \chi_-^{n-m'}}{\{(n+m')! (n-m')!\}^{1/2}} d_{m'm}^{(n)}(\beta) \quad .$$

Bajo la rotación considerada los espinores transforman mediante la relación

$$\begin{bmatrix} \chi_+ \\ \chi_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\beta/2) & \text{sen}(\beta/2) \\ -\text{sen}(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi_+ \\ \chi_- \end{bmatrix} \quad , \quad (9.18)$$

siendo precisamente la matriz involucrada la representación espinorial del operador de rotación  $G(0, \beta, 0)$ . Utilizando ésta información en la ecuación (9.17) y mediante el desarrollo del binomio se muestra que:

(9.19)

$$d_{m'm}^{(n)}(\beta) = \left\{ \frac{(n+m')!(n-m')!}{(n+m)!(n-m)!} \right\}^{1/2} \sum_{\sigma} \left[ \begin{matrix} n+m \\ n-m'-\sigma \end{matrix} \right] \cdot \left[ \begin{matrix} n-m \\ \sigma \end{matrix} \right] \cdot (-1)^{n-m'-\sigma} \left\{ \cos(\beta/2) \right\}^{2\sigma+m+m'} \left\{ \sin(\beta/2) \right\}^{2n-2\sigma-m-m'}$$

siendo

$$\left[ \begin{matrix} n \\ \sigma \end{matrix} \right] = \frac{n!}{\sigma!(n-\sigma)!} \quad , \quad (9.20)$$

donde la suma se extiende en valores de " $\sigma$ " tales que los argumentos de todos los factoriales implícitos en los coeficientes binomiales sean mayores o iguales a cero.

Se denominarán "esféricos armónicos  $Y^S$  en la representación estándar" a aquellos definidos mediante la relación

$$Y_{mn}^S(\theta, \phi) = (-1)^m \varepsilon_{mn} P_n^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad , \quad (9.21)$$

y "esféricos armónicos  $Y^P$  en la representación de paridad" a los dados por

$$Y_{\sigma mn}^P(\theta, \phi) = (-1)^m \varepsilon_{mn} P_n^m(\cos\theta) g_{\sigma m}(\phi) \quad , \quad (9.22)$$

con  $g_{\sigma m}(\phi)$  dado por la ecuación (5.13) y la constante de normalización

$$\varepsilon_{mn} = \frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \quad . \quad (9.23)$$

El anterior formalismo que establece la matriz de rotación de los esféricos armónicos  $G(\alpha, \beta, \gamma)$  es aplicable a éstos en la representación estándar. Para obtener el operador de rotación equivalente en la representación de paridad es necesario considerar que

$$Y_{1mn}^P = \frac{-i}{2} ( Y_{mn}^S - Y_{mn}^{S*} ) , \quad (9.24a)$$

$$Y_{-1mn}^P = \frac{1}{2} ( Y_{mn}^S + Y_{mn}^{S*} ) , \quad (9.24b)$$

de modo que conviene definir una matriz "A" que permita pasar de una representación a otra, esto es,

$$Y_{\sigma mn}^P = \sum_{u=1}^{\infty} \sum_{v=-u}^u A_{\sigma mn, vu} Y_{vu}^S . \quad (9.25)$$

El satisfacer las condiciones (9.24) y el hecho de que para  $m=0$ ,  $Y_{10n}^P = 0$  y  $Y_{-10n}^P = Y_{0n}^S$  conduce a una matriz "A" cuyos elementos no nulos son:

$$A_{-1mn, -mn} = \frac{1}{2} \cdot (-1)^m , \quad (9.26a)$$

$$A_{-1mn, mn} = \frac{1}{2} , \quad (9.26b)$$

$$A_{1mn, -mn} = \frac{i}{2} \cdot (-1)^m , \quad (9.26c)$$

$$A_{1mn,mn} = \frac{-i}{2} , \quad (9.26d)$$

$$A_{-10n,0n} = 1 . \quad (9.26e)$$

Combinando las expresiones matriciales se obtiene:

$$Y^P = A Y^S , \quad (9.27)$$

$$G Y^S = Y^{rS} . \quad (9.28)$$

Esta última relación resume el efecto de la matriz de rotación sobre los armónicos esféricos en la representación estándar para generar los armónicos en el sistema girado (ecuación 9.6). Se concluye que los esféricos armónicos en la representación de paridad una vez actuado sobre ellos el operador de rotación, están dados por

$$Y^{rP} = A G A^{-1} Y^P . \quad (9.29)$$

Así pues la matriz de rotación en la representación de paridad es

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = A G(\alpha, \beta, \gamma) A^{-1} , \quad (9.30)$$

estando la matriz "G" definida mediante (9.11) y (9.19).

Duplicando en los lugares adecuados (según el orden en que se haya definido el barrido en los índices) se establece el operador de rotación sobre los armónicos esféricos

vectoriales dados en la representación de paridad

$$\Psi_{\tau\sigma mn}^r = \sum_{m'\nu} D_{m'\nu, m\sigma}^{(n)} \Psi_{\tau\nu m'n} \quad , \quad (9.31)$$

donde el índice "n" es invariante bajo la rotación de la matriz D la cual es función de los ángulos de Euler  $\alpha, \beta$  y  $\gamma$  que definen la orientación del sistema girado respecto al original (Arfken, 1970). En notación matricial la ecuación (9.31) se escribe como

$$\Psi_n^r = D(\alpha, \beta, \gamma) \Psi_n \quad . \quad (9.32)$$

Los campos incidente y dispersado están dados por

$$\vec{E}^{inc} = \sum_n D^{-1} a_n \text{Re} \Psi_n^r \quad , \quad (9.33a)$$

$$\vec{E}^{disp} = \sum_n D^{-1} f_n \Psi_n^r \quad , \quad (9.33b)$$

respecto al sistema girado. Los nuevos coeficientes utilizados en las expansiones de éstos campos resultan ser

$$a^r = D^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) a \quad , \quad (9.34a)$$

$$f^r = D^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) f \quad . \quad (9.34b)$$

La matriz de transición en el nuevo sistema es definida tal que

$$f^r = T^r a^r \quad , \quad (9.35)$$

de donde resulta

$$T^r = D^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) T D(\alpha, \beta, \gamma) \quad . \quad (9.36)$$

Esta es la expresión básica para calcular la matriz  $T$  de un dispersor girado a partir de la matriz referida al sistema de coordenadas en el cual los semiejes coinciden con los respectivos ejes coordenados.

La matriz  $T$  de un dispersor girado un ángulo  $\beta$  respecto al eje  $Z$ , hacia el eje  $X$ , se obtiene asignando valores nulos a los otros dos ángulos de Euler. Es así como se hace posible el estudio de sistemas cuyo campo no posee simetría axial, como el mostrado en la figura 9.1.

La figura 9.2 muestra espectros obtenidos para diferentes valores de  $\beta$ . Se hace evidente que las frecuencias de resonancia se corren hacia el rojo a la vez que aumenta la intensificación al aumentar  $\beta$ . Estos cálculos se han hecho para dispersores pequeños en relación a las longitudes de onda del campo incidente ( $a=5,0$  nm;  $b=5,556$  nm) con incidencia por el eje  $Z$  y polarización paralela al eje  $X$ . El punto de observación es frente al esferoide sin girar, sobre el eje  $X$ , con  $r=11,112$  nm y  $d=11,112$  nm.

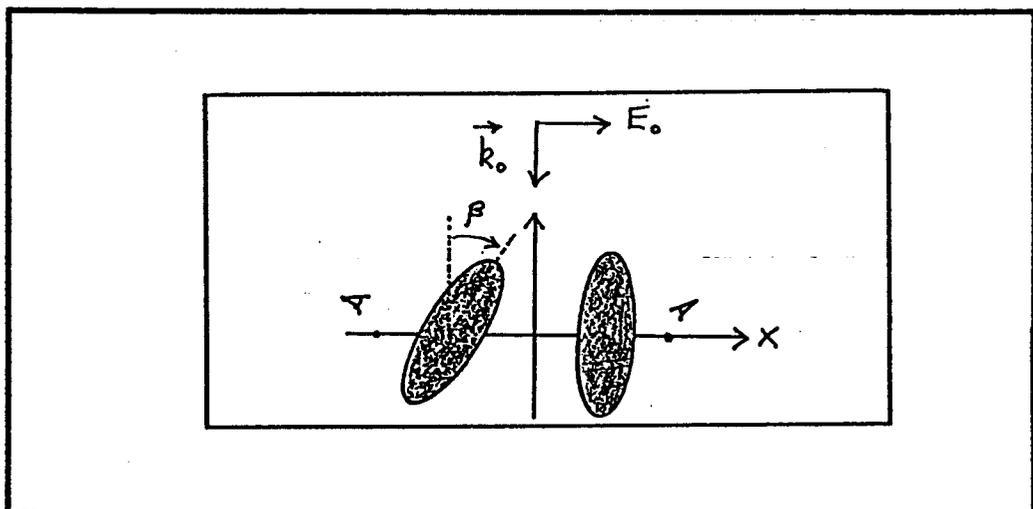


Fig. 9.1 Sistema dispersor formado por dos esferoides prolatos de plata desplazados en el eje "X" y estando uno de ellos girado hacia el otro.

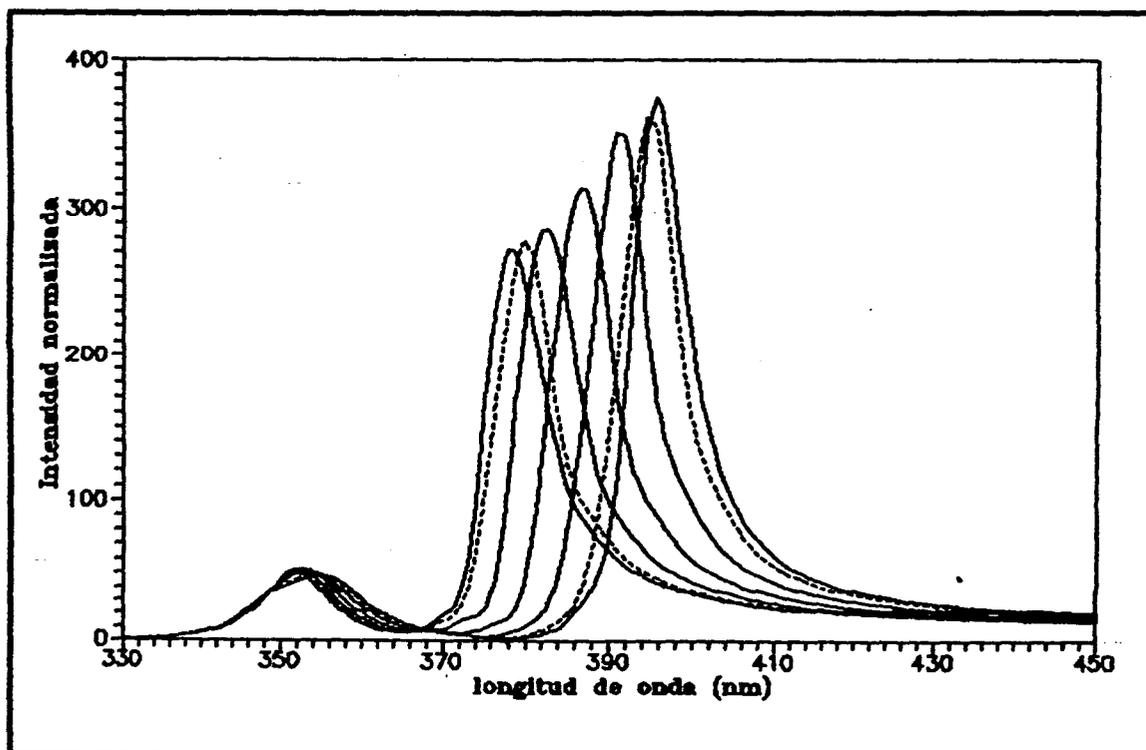


Fig. 9.2 Espectro de intensidad para el sistema de dos esferoides de plata, con distintos ángulos de giro de un elipsoide hacia el otro.

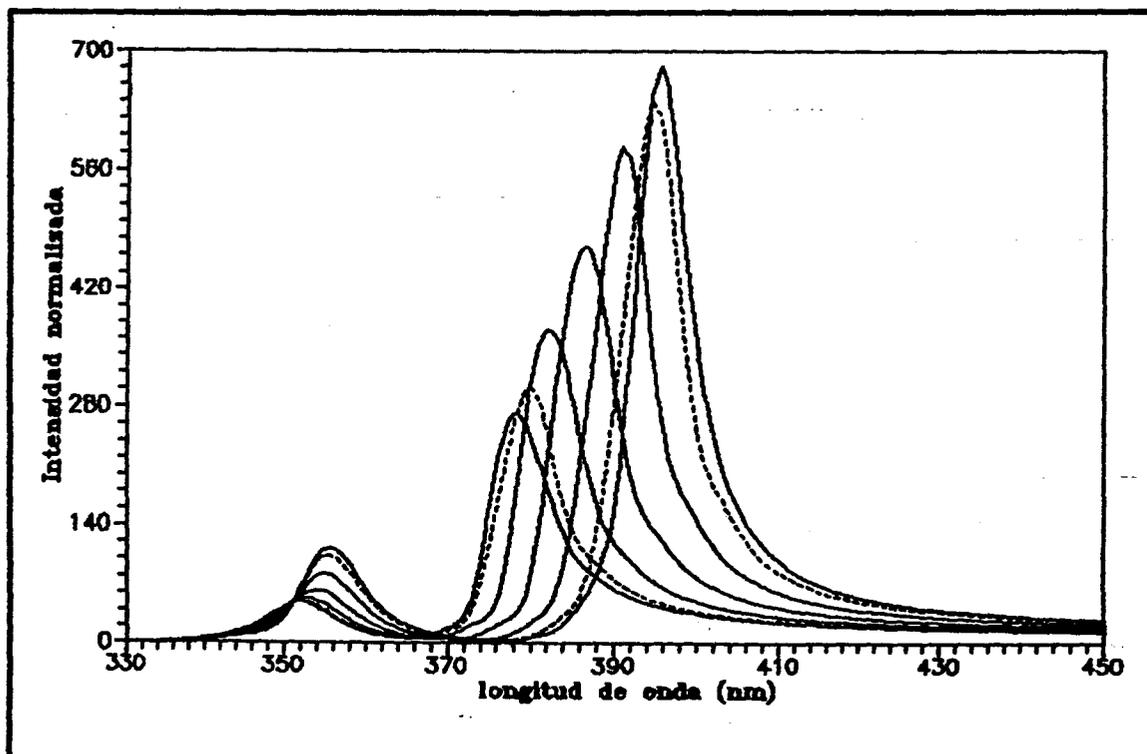


Fig. 9.3 Espectro de intensidad del sistema de dos esferoides de plata siendo el punto de observación opuesto al utilizado en los cálculos de la figura 9.2.

En la figura 9.3 se ha incluido el espectro del mismo sistema con el punto de observación opuesto al utilizado en los cálculos relativos a la figura 9.2 o sea cerca del esferoide girado. En éste caso la intensificación del campo es aproximadamente el doble de la calculada en el otro punto.

En la tabla 9.1 se especifican las longitudes de resonancia para los dos picos presentes, en función del ángulo de giro  $\beta$ . La posición de las resonancias responde a una dependencia sinusoidal con el ángulo de giro siendo más pronunciado el corrimiento para el pico de mayor intensidad. Otro detalle que surge de la comparación de las figuras 9.2 y 9.3 es que la posición de los picos es prácticamente la misma en ambos casos. Era de esperarse pues la resonancia del sistema no depende del punto de observación sino de la respuesta de éste como un todo. Lo que depende del punto de observación es la intensidad del campo electromagnético siendo la geometría de mayor intensificación aquella que corresponde a un giro de 90 grados de un elipsoide hacia el otro que permanece con su semieje mayor paralelo al eje Z.

$\beta^\circ$	$\lambda_1$ (nm)	$\lambda_2$ (nm)
0	378,41	351,73
15	379,90	351,73
30	382,41	352,16
45	386,50	352,59
60	390,67	353,45
75	394,40	354,75
90	395,48	355,19

Tabla 9.1 Longitudes de onda de resonancia de los dos picos presentes en los espectros de intensidad del sistema mostrado en la figura 9.1.  $\lambda_1$  se refiere al pico de mayor intensidad y  $\lambda_2$  al de menor intensidad.

La figura 9.4 resume la información contenida en la tabla 9.1 a la vez que incluye las curvas de regresión que son relaciones sinusoidales dadas por:

$$\lambda_1(\beta) = 386,82 - 8,44 \cdot \cos(2\beta) \quad , \quad (9.37)$$

$$\lambda_2(\beta) = 353,10 - 1,68 \cdot \cos(2\beta) \quad . \quad (9.38)$$

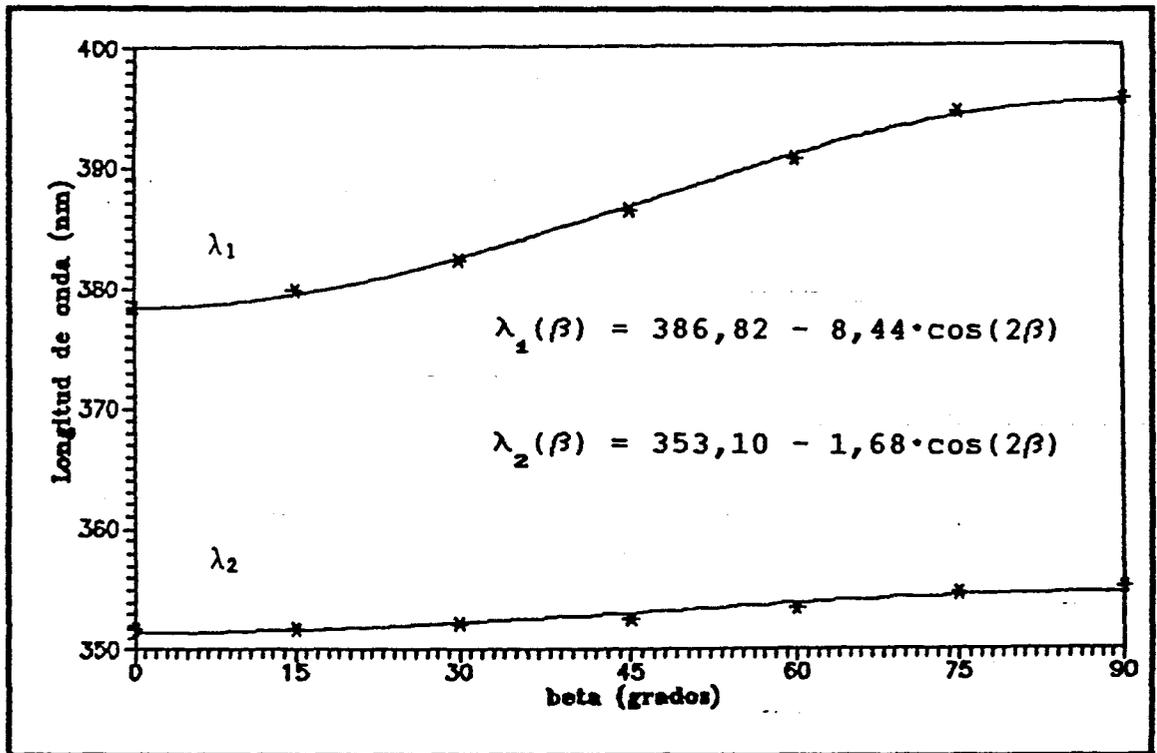


Fig. 9.4 Dependencia sinusoidal de la posición de las resonancias con el ángulo de giro de un esferoide hacia el otro.

Tratándose de un sistema con simetría axial, girando ambos esferoides uno hacia el otro según se indica en la figura

9.5, también se obtiene una dependencia sinusoidal en la posición de los picos de resonancia; siendo en éste caso mayor la intensificación aquella que corresponde a los elipsoides girados 90 grados, en contacto. Se hace referencia acá a los comentarios incluidos al final del capítulo 7.

La figura 9.6 muestra el espectro del sistema mencionado y en el cuadro 9.2 se incluyen las frecuencias de resonancia de ambos picos. La figura 9.7 incluye las curvas de regresión que indican de nuevo una dependencia sinusoidal con el ángulo de giro de ambos esferoides. Las ecuaciones de regresión han sido obtenidas mediante el método de mínimos cuadrados. El barrido en energía del campo incidente se ha hecho con una resolución de 0,03 eV y los datos de intensidad se han sometido a un suavizado mediante un trazador cúbico natural (Burden y Faires, 1978).

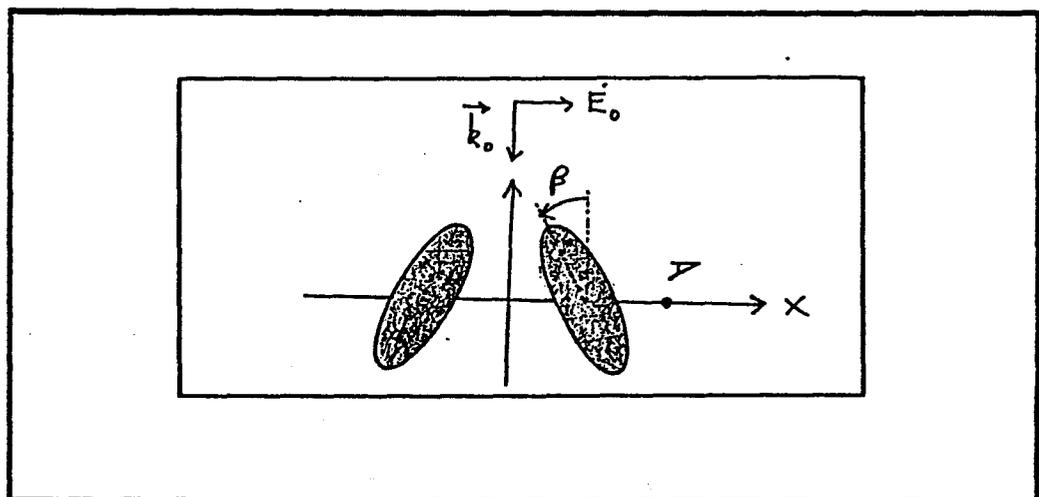


Fig. 9.5 Sistema de dos esferoides de plata, con simetría axial. La radiación incide por el eje Z, polarizada en X y observándose sobre el eje X; en  $r=11,112$  nm; el radio de la esfera de inclusión del conjunto.

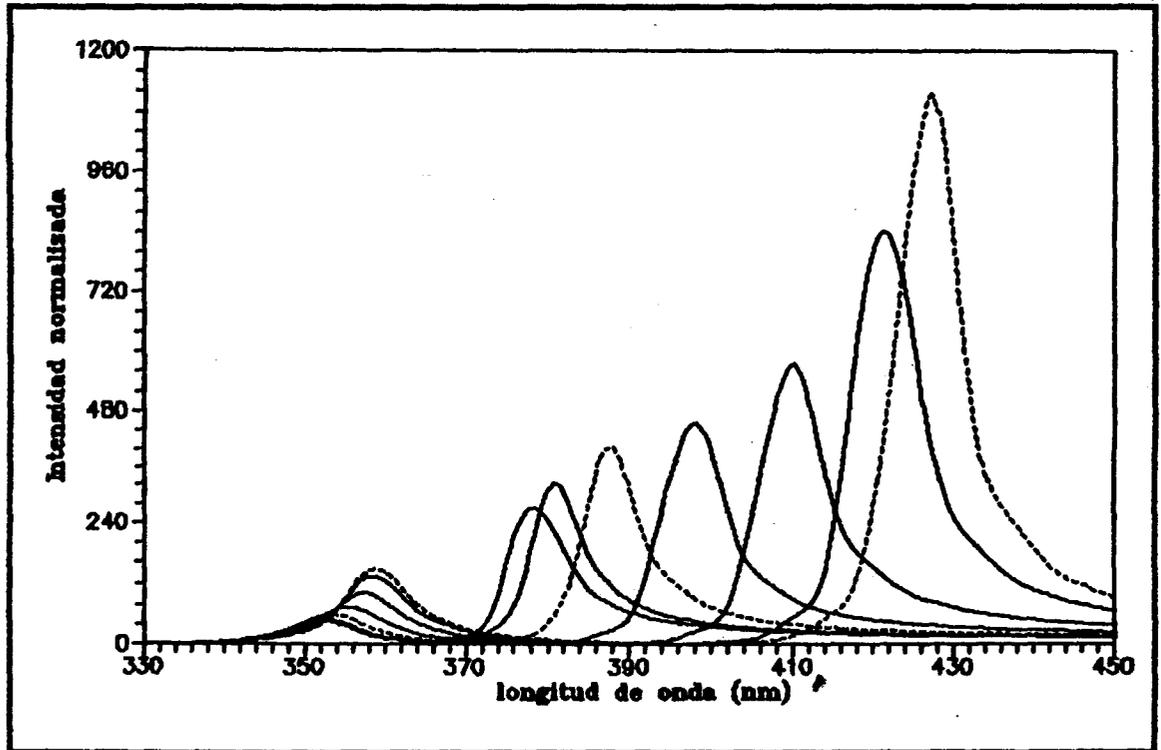


Fig. 9.6 Espectro del sistema mostrado en la figura 9.5 para distintos ángulos de giro en ambos esferoides, uno hacia otro.

$\beta^\circ$	$\lambda_1$ (nm)	$\lambda_2$ (nm)
0	378,31	351,90
15	381,10	351,90
30	387,54	353,71
45	397,98	355,54
60	409,82	357,38
75	421,52	358,62
90	427,62	358,62

Tabla 9.2 Longitudes de onda de resonancia de los dos picos presentes en el espectro del sistema mostrado en la figura 9.5.

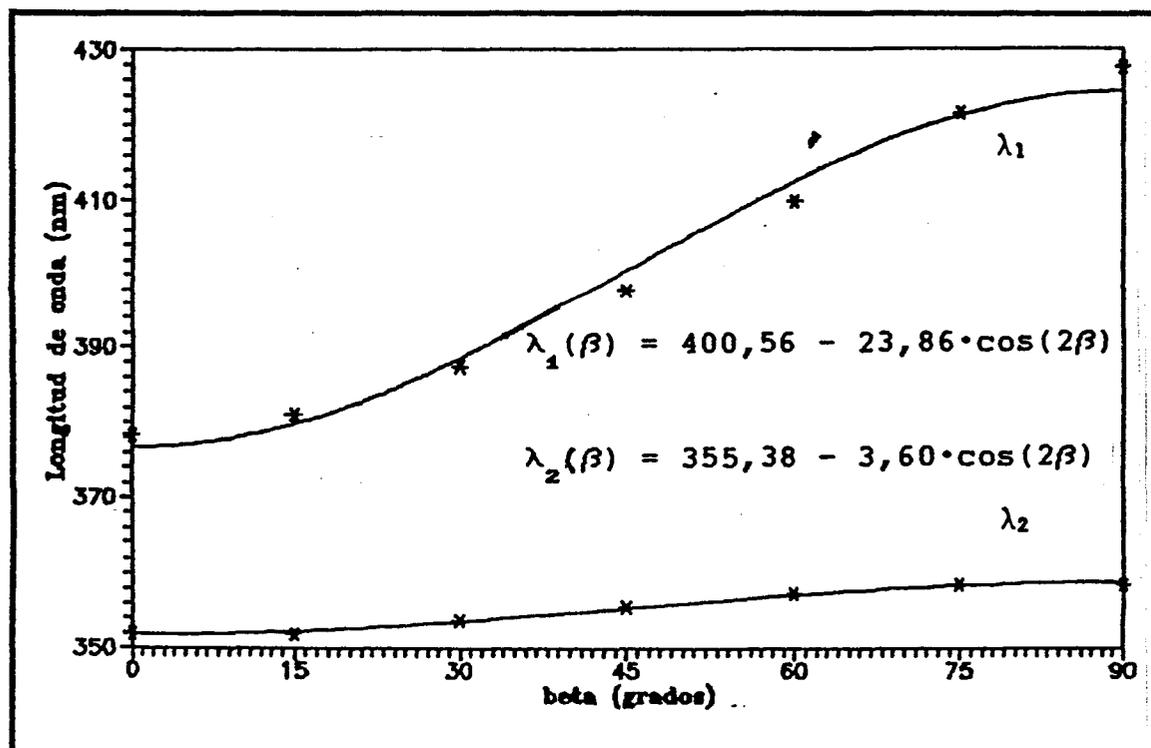


Fig. 9.7 Dependencia sinusoidal de los picos de resonancia presentes en el sistema mostrado en la figura 9.5.

Las ecuaciones de ajuste obtenidas son

$$\lambda_1(\beta) = 400,56 - 23,86 \cdot \cos(2\beta) \quad , \quad (9.39)$$

$$\lambda_2(\beta) = 355,38 - 3,60 \cdot \cos(2\beta) \quad . \quad (9.40)$$

Todos los espectros considerados presentan dos picos de resonancia. Uno de ellos (el de mayor intensidad) es atribuido a la resonancia híbrida presente aún en el caso de un esferoide aislado; debida al comportamiento colectivo de los electrones de conducción a nivel de la superficie y de los electrones "d" ligados. La presencia de un segundo pico es un efecto del acercamiento de los esferoides y la interacción mutua entre ellos.

## 10. CONCLUSIONES.

Al exponer a radiación monocromática y coherente un material conductor, en el ámbito de frecuencias del infrarrojo al ultravioleta, se excitan los modos naturales de oscilación del gas de electrones libres o de conducción. Estos participan de movimientos colectivos tanto en el seno del material como en su superficie.

Para frecuencias inferiores a la de plasma, las oscilaciones de superficie pueden excitarse estableciéndose un polaritón: una onda con contribución de la oscilación de superficie y de la onda electromagnética incidente. Si la frecuencia del campo incidente coincide con la de alguno de los modos naturales de oscilación superficial, se produce la excitación del respectivo plasmón de superficie lo cual supone la absorción de la energía del haz incidente. Las frecuencias naturales dependen tanto de la densidad de electrones libres y su masa óptica efectiva, como de las condiciones de frontera de los campos electromagnéticos en la geometría específica.

Para dispersores esferoidales, en el límite electrostático, solamente el modo dipolar eléctrico es excitado. Sin embargo al tender al límite electrodinámico se da un corrimiento hacia el rojo del pico que ahora posee una naturaleza básicamente dipolar y una caída en su intensidad con el consiguiente ensanchamiento debido a la disminución en el tiempo de decaimiento del plasmón de superficie respectivo; a la vez que se excitan plasmones de orden superior.

El comportamiento descrito, referido a la frecuencia de plasma, supone que el gas de electrones obedece el modelo del electrón libre o de Drude. En realidad, para la mayoría de los metales, en la región ultravioleta, la función dieléctrica (en su parte real) tiene una contribución positiva asociada a las transiciones interbanda. Ello produce un corrimiento hacia el rojo en la frecuencia de plasma y una caída en la intensidad de los picos los cuales ahora son producto de resonancias híbridas en las que además de la excitación de las ondas de superficie se incluye la excitación de electrones ligados, desde la banda "d" hacia bandas superiores, siempre bajo del nivel de Fermi. El que la intensidad de las resonancias sea inferior se debe a que las transiciones interbanda también producen una contribución positiva en la parte imaginaria de la función dieléctrica con lo cual el decaimiento de la onda se torna más pronunciado.

Para una frecuencia de la radiación incidente igual a la de plasma, se produce absorción. En éste caso es la excitación de los plasmones de volumen la causa primaria de la intensificación en ausencia de las transiciones interbanda; pero de hecho ya en metales reales y en ésta región de frecuencias ( $\omega \geq \omega_p$ ) el efecto de las ondas longitudinales pasa a un segundo plano y son dominantes las mencionadas excitaciones de los electrones ligados.

En particular, la plata experimenta una transición interbanda en 3,6 eV y para dispersores de geometría esférica en régimen electrostático, la frecuencia natural del modo dipolar eléctrico es de 3,5 eV no pudiéndose distinguir ésta estructura fina en los espectros calculados debido al corto tiempo de relajación de la transición interbanda en relación al de los plasmones de volumen.

Al considerar una pareja de dispersores esféricos o esferoidales, una segunda resonancia ( $\lambda_2$ ) se ha calculado y el depender su posición de parámetros que definen la geometría del sistema es indicio de que su existencia es un efecto del agrupamiento de los dispersores. La otra resonancia ( $\lambda_1$ ) es más sensible a la geometría del sistema y se interpreta como la respuesta conjunta de las oscilaciones de superficie y la mencionada transición interbanda; pudiéndose atribuir la fuerte dependencia a que el campo electromagnético en el cual se encuentra inmerso el esferoide ha sido modificado por la presencia del otro miembro de la pareja.

Debido a la interacción entre esferoides, intensificaciones relativas del orden de  $10^9$  han sido obtenidas. Mayores intensificaciones podrían ser calculadas si los esferoides tuviesen una mayor excentricidad. De las variables consideradas, separación y orientación relativa, el corrimiento hacia el rojo es menos sensible a la orientación de las partículas del sistema (Vargas W., Cruz L., Fonseca L.F., Gómez M. 1989). Se ha encontrado una dependencia exponencial de la posición de las resonancias con la separación entre los dispersores y una relación sinusoidal con la orientación entre éstos.

Los cálculos realizados en ésta investigación serán importantes para predecir el ancho de las resonancias observadas en sistemas experimentales compuestos de una colección de dispersores con una distribución aleatoria de distancias entre dispersores y orientaciones.

## REFERENCIAS.

1. Abramowitz M., Stegun I.A., Handbook of mathematical functions, Dover, New York (1972).
2. Arfken G., Mathematical Methods for Physicists, Academic Press, New York (1985).
3. Barber P.W., Chang R.K., Massoudi H., Electrodynamic calculations for the surface-enhanced electric intensities on large Ag spheroids, Physical Review B 27, 7251 (1983).
4. Barber P.W., Yeh C., Scattering of electromagnetic waves by arbitrarily shaped dielectric bodies, Applied Optics 14, 2864 (1975).
5. Borghese F., Denti P., Saija R., Toscano G., Multiple electromagnetic scattering from a cluster of spheres, Aerosol Science and Technology 3, 227 (1984).
6. Burden R.L., Faires J.D., Análisis Numérico, Editorial Iberoamericana, México (1986).
7. Carr G.L., Perkowitz S., Tanner D.B., Far-infrared Properties of Inhomogeneous Materials, Academic Press, New York (1985).

8. Claro F., Multipolar effects in particulate matter, Solid State Communications 49, 229 (1984).
9. Claro F., Theory of resonant modes in particulate matter, Physical Review B 30, 4989 (1984).
10. Claro F., Fuchs R., Optical absorption by clusters of small metallic spheres, Physical Review B 33, 7956 (1986).
11. Cline M.P., Barber P.W., Chang R.K., Surface-enhanced electric intensities on transition-and noble-metal spheroids, Journal of the Optical Society of America B 3, 15 (1986).
12. Cruz L., T-Matrix approach for the calculation of local fields in the neighborhood of small clusters in the electrodynamic regime, M.Sc. Thesis University of Puerto Rico, unpublished (1989).
13. Cruz L., Fonseca L.F., Gómez M., T-matrix Approach for the calculation of Local Fields in the Neighborhood of Small Clusters in the Electrodynamic Regime, Physical Review B 40, 7491 (1989).
14. Davidov A.S., Teoría del Sólido, Mir, Moscú (1981).
15. Edmonds A.R., Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton, New Jersey (1957).

16. Ehrenreich H., Philipp H.R., Optical Properties of Ag and Cu, Physical Review 128, 1622 (1962).
17. Flores F., García Moliner F., Excitaciones en superficies sólidas, Investigación y Ciencia 45, 20 (1980).
18. Fonseca L.F., Correlation Effects on the optical properties of metal-insulator composite materials, Ph.D. Thesis University of Puerto Rico, unpublished (1984).
19. Fuchs R., Claro F., Multipolar response of small metallic spheres: nonlocal theory, Physical Review B 35, 3722 (1987).
20. Galindo A., Pascual P., Mecánica Cuántica, Alhambra, Madrid (1978).
21. Gérardy J.M., Ausloos M., Absorption spectrum of clusters of spheres from the general solution of Maxwell's equations, Physical Review B 25, 4204 (1982).
22. Jackson J.D., Electrodinámica Clásica, Alhambra, Madrid (1980).
23. Johnson P.B., Christy R.W., Optical Constants of the Noble Metals, Physical Review B 6, 4370 (1972).

24. Kerker M., Wang D., Chew H., Surface enhanced Raman Scattering (SERS) by molecules adsorbed at spherical particles, Applied Optics 19, 4159 (1980).
25. Kim Y.H., Tanner D.B., Far-Infrared absorption by aluminum small particles, Physical Review B 39, 3585 (1989).
26. Knittl Z., Optics of Thin Films, Wiley, New York (1976).
27. Kreibig U., Genzel L., Optical absorption of small metallic particles, Surface Science 156, 678 (1985).
28. Liver N., Nitzan A., Gersten J.I., Local fields in cavity sites of rough dielectric surfaces, Chemical Physics Letters 111, 449 (1984).
29. Martinos S.S., Optical absorption spectra for silver spherical particles, Physical Review B 39, 1363 (1989).
30. Martinos S.S., Surface electromagnetic modes in metal spheres, Physical Review B 31, 2029 (1985).
31. Maxwell J.C., A treatise on electricity and magnetism, Dover, New York (1954).

32. Melnyk A.R., Harrison M.J., Theory of Optical Excitations of Plasmons in Metals, Physical Review B 2, 835 (1970).
33. Moskovits M., Surface-enhanced Spectroscopy, Reviews of Modern Physics 57, 783 (1985).
34. Nassau K., Las causas del color, Investigación y Ciencia 51, 56 (1980).
35. Ortiz C., Interacción de la radiación láser con los materiales, Investigación y Ciencia 142, 50 (1988).
36. Perenboom J.A.A.J., Wyder P., Meier F., Electronic Properties of Small Particles, Physics Reports 78, 173 (1981).
37. Peterson B., Ström S., T matrix for electromagnetic scattering from an arbitrary number of scatterers and representations of  $E(3)$ , Physical Review D 8, 3661 (1973).
38. Raether H., Excitation of Plasmons and Interband Transitions by electrons, Springer Verlag, Berlin (1980).
39. Sansonetti J.E., Furdyna J.K., Depolarization effects in arrays of spheres, Physical Review B 22, 2866 (1980).

40. Sen P.N., Tanner D.B., Far-infrared absorption by fine-metal-particle composites, Physical Review B 26, 3582 (1982).
41. Stratton J.A., Electromagnetic Theory, McGraw Hill, New York (1941).
42. Ström S., T matrix for electromagnetic scattering from and arbitrary number of scatterers with continuously varying electromagnetic properties, Physical Review D 10, 2685 (1974).
43. Van der Hulst H.C., Light scattering by small particles, Dover, New York (1957).
44. Varadan V.K., Bringi V.N., Varadan V.V., Coherent electromagnetic wave propagation through randomly distributed dielectric scatterers, Physical Review D 19, 2480 (1979).
45. Varadan V.K., Varadan V.V., Acoustic, Electromagnetic and Elastic Wave Scattering-Focus on the T-Matrix Approach, Pergamon Press, Ohio (1979).
46. Vargas W., Cruz L., Fonseca L.F., Gómez M., Local fields around clusters of rotated ellipsoids using a T-matrix approach, sometido para publicación en Applied Optics (1989).

47. Waterman P.C., *Symmetry, unitarity, and geometry in electromagnetic scattering*, Physical Review D 3, 825 (1971).
48. Waterman P.C., *Matrix Methods in potential theory and electromagnetic scattering*, Journal of Applied Physics 50, 4550 (1979).
49. Wooten F., *Optical Properties of Solids*, Academic Press, New York (1972).

APENDICE A. EXPANSION DE UNA ONDA PLANA EN MULTIPOLOS.

Dada una onda plana de la forma  $\vec{E}(\vec{r}) = \hat{e}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  estando la polarización especificada mediante el vector unitario  $\hat{e}_0$ , ésta se expresa como una superposición de soluciones elementales a la ecuación vectorial de Hemholtz. Para ello, partiendo de la relación

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 4 \sum_{\sigma mn} i^n n(n+1) \gamma_{mn} j_n(kr) Y_{\sigma mn}(\theta, \phi) Y_{\sigma mn}(\alpha, \beta), \quad (A.1)$$

con  $(\theta, \phi)$  y  $(\alpha, \beta)$  como coordenadas angulares esféricas asociadas a los vectores  $\vec{r}$  y  $\vec{k}$  respectivamente; utilizando el operador de momentum angular  $\vec{L}$  que satisface

$$L^2 Y_{\sigma mn}(\theta, \phi) = n(n+1) Y_{\sigma mn}(\theta, \phi), \quad (A.2)$$

se muestra que

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 4 \sum_{\sigma mn} i^n \gamma_{mn} j_n(kr) \vec{A}_{1\sigma mn}(\theta, \phi) \cdot \vec{A}_{1\sigma mn}(\alpha, \beta), \quad (A.3)$$

con

$$\vec{L} = -i \vec{r} \times \vec{\nabla}, \quad (A.4)$$

$$\vec{A}_{1\sigma mn}(\theta, \phi) = \vec{\nabla} \times [\vec{r} Y_{\sigma mn}(\theta, \phi)], \quad (A.5)$$

$$\vec{L} Y_{\sigma mn}(\theta, \phi) = -i \vec{A}_{1\sigma mn}(\theta, \phi). \quad (A.6)$$

La onda plana se expresa como una superposición de soluciones elementales

$$\vec{E} = \sum_{\sigma mn} [ a_{1\sigma mn} \operatorname{Re} \vec{\Psi}_{1\sigma mn} + a_{2\sigma mn} \operatorname{Re} \vec{\Psi}_{2\sigma mn} ] \quad , \quad (\text{A.7})$$

y una relación análoga para el campo  $\vec{H} = (i\omega\mu)^{-1} \vec{\nabla} \times \vec{E}$ .  
Luego, apoyados en que:

$$\vec{\Psi}_{1\sigma mn}(\vec{r}) = \gamma_{mn}^{1/2} j_n(kr) \vec{A}_{1\sigma mn}(\theta, \phi) \quad , \quad (\text{A.8})$$

$$\vec{\Psi}_{2\sigma mn}(\vec{r}) = k^{-1} \vec{\nabla} \times \vec{\Psi}_{1\sigma mn}(\vec{r}) \quad , \quad (\text{A.9})$$

y en las relaciones de ortogonalización

$$\gamma_{mn}^{1/2} \int_{\Omega} d\Omega \vec{A}_{1\sigma mn} \cdot \vec{A}_{1\sigma' m' n'} = \pi \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \quad , \quad (\text{A.10})$$

$$\int_{\Omega} d\Omega \vec{A}_{1\sigma mn} \cdot [ \vec{\nabla} \times \vec{\Psi}_{1\sigma' m' n'} ] = 0 \quad , \quad (\text{A.11})$$

con  $d\Omega$  como diferencial de ángulo sólido en coordenadas esféricas; se obtienen las expresiones que permiten la evaluación de los coeficientes "a" de la ecuación (A.7):

$$\pi a_{10mn} j_n(kr) = \gamma_{mn}^{1/2} \int_{\Omega} d\Omega \hat{\mathbf{E}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_{10mn} \quad , \quad (\text{A.12})$$

$$\pi a_{20mn} j_n(kr) = i \gamma_{mn}^{1/2} \int_{\Omega} d\Omega \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{E}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_{10mn} \quad , \quad (\text{A.13})$$

siendo en ésta última expresión  $\hat{\mathbf{k}}$  el vector unitario asociado al vector de onda. Utilizando la ecuación (A.3) en las integrales (A.12) y (A.13) se obtiene la forma general de los coeficientes

$$a_{\tau 0mn} = 4 \hat{\mathbf{e}}_0 \cdot \vec{\mathbf{a}}_{\tau 0mn}(\alpha, \beta) \quad , \quad (\text{A.14})$$

con

$$\vec{\mathbf{a}}_{\tau 0mn}(\alpha, \beta) = i^{n-\tau+1} \gamma_{mn}^{1/2} \vec{\mathbf{A}}_{\tau 0mn}(\alpha, \beta) \quad (\text{A.15})$$

y

$$\vec{\mathbf{A}}_{20mn}(\alpha, \beta) = r \vec{\nabla} Y_{0mn}(\alpha, \beta) \quad . \quad (\text{A.16})$$

Ya definidos los vectores  $\vec{\mathbf{A}}_{\tau 0mn}$  resumimos sus propiedades de ortogonalización mediante la relación

$$(\text{A.17})$$

$$\gamma_{mn}^{1/2} \int d\Omega \vec{\mathbf{A}}_{\tau 0mn}(\theta, \phi) \cdot \vec{\mathbf{A}}_{\tau' 0m'n'}(\theta, \phi) = \pi \delta_{\tau\tau'} \delta_{00'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \quad .$$

Utilizando las definiciones dadas en el capítulo 5

(ecuaciones 5.13 y 5.32), se escriben las formas explícitas de los vectores  $\vec{A}_{\tau\sigma mn}$  como

$$\vec{A}_{1\sigma mn} = -\tau_n^m g_{\sigma m} \hat{\phi} + \sigma m \pi_n^m g_{-\sigma m} \hat{\theta} \quad , \quad (\text{A.18})$$

$$\vec{A}_{2\sigma mn} = \tau_n^m g_{\sigma m} \hat{\theta} + \sigma m \pi_n^m g_{-\sigma m} \hat{\phi} \quad , \quad (\text{A.19})$$

siendo útil para la evaluación numérica de  $\tau_n^m$  la expresión

$$\tau_n^m = m \cos(\theta) \pi_n^m - \text{sen}(\theta) \pi_n^{m+1} \quad (\text{A.20})$$

y para el cálculo de las funciones asociadas de Legendre, la relación de recurrencia

$$(n-m) \cdot \pi_n^m = (2n-1) \cdot \cos(\theta) \cdot \pi_{n-1}^m - (n-1+m) \cdot \pi_{n-2}^m \quad . \quad (\text{A.21})$$

Los vectores  $\vec{a}_{\tau\sigma mn}$  adquieren la forma explícita

$$\vec{a}_{1\sigma mn} = i^n \gamma_{mn}^{1/2} \left\{ -\tau_n^m g_{\sigma m} \hat{\phi} + \sigma m \pi_n^m g_{-\sigma m} \hat{\theta} \right\} \quad , \quad (\text{A.22})$$

$$\vec{a}_{2\sigma mn} = i^{n-1} \gamma_{mn}^{1/2} \left\{ \tau_n^m g_{\sigma m} \hat{\theta} + \sigma m \pi_n^m g_{-\sigma m} \hat{\phi} \right\} \quad . \quad (\text{A.23})$$

Una ecuación equivalente a la (A.8) para la  $n$ -ésima solución elemental tipo eléctrico (válida en la zona radiativa) es

$$\Psi_{20mn}(\vec{r}) = \gamma_{mn}^{1/2} j_{n-1}(kr) \tilde{A}_{20mn}(\theta, \phi) \quad . \quad (A.24)$$

Estas formas de expresar las soluciones elementales permiten establecer expresiones aproximadas en la zona radiativa; sustituyendo las funciones de Bessel por las respectivas funciones de Hankel y utilizando la forma asintótica de dichas funciones para argumentos grandes,

$$h_n^{(1)}(\rho) \cong \frac{1}{\rho} (-i)^{n+1} e^{i\rho} \quad , \quad (A.25)$$

obteniéndose

$$\Psi_{\tau 0mn}(\vec{r}) = -\gamma_{mn}^{1/2} (-i)^{n-\tau} \frac{e^{ikr}}{kr} \tilde{A}_{\tau 0mn}(\theta, \phi) \quad . \quad (A.26)$$

APENDICE B. MATRIZ DE TRASLACION DE LAS SOLUCIONES  
ELEMENTALES A LA ECUACION DE HEMHOLTZ.

Las formas explícitas de la matriz  $S(\vec{a})$ , siendo  $(a, \eta, \psi)$  las coordenadas esféricas asociadas al vector de traslación  $\vec{a}$ , son

(B.1)

$$S_{10mn, 10m'n'} = \frac{1}{2}(-1)^m (\varepsilon_m \varepsilon_{m'})^{1/2} [(-1)^{m'} C_{mn, m'n'} \cos(m-m')\psi + (-1)^\sigma C_{mn, -m'n'} \cos(m+m')\psi] ,$$

(B.2)

$$S_{10mn, 10m'n'} = \frac{1}{2}(-1)^m (\varepsilon_m \varepsilon_{m'})^{1/2} [(-1)^{m'+\sigma} C_{mn, m'n'} \sen(m-m')\psi + C_{mn, -m'n'} \sen(m+m')\psi] ,$$

(B.3)

$$S_{10mn, 20m'n'} = \frac{i}{2}(-1)^m (\varepsilon_m \varepsilon_{m'})^{1/2} [(-1)^{m'+\sigma} D_{mn, m'n'} \cos(m-m')\psi + D_{mn, -m'n'} \cos(m+m')\psi] ,$$

(B.4)

$$S_{10mn, 20m'n'} = \frac{i}{2}(-1)^m (\varepsilon_m \varepsilon_{m'})^{1/2} [(-1)^{m'} D_{mn, m'n'} \sen(m-m')\psi + (-1)^\sigma D_{mn, -m'n'} \sen(m+m')\psi] ,$$

con  $\varepsilon_0=1$  y  $\varepsilon_m=2$  para todo  $m=1,2,3,\dots,n$ .

Además, para  $\tau$  distinto de  $\tau'$ , se cumple la relación

$$S_{10mn, \tau \sigma' m' n'} = S_{20mn, \sigma' \tau' m' n'} \quad (B.5)$$

Los elementos de las matrices C y D son dados por:

$$C_{mn, m'n'} = \frac{1}{2} (-1)^{m'} \sum_{\lambda=|n-n'|}^{n+n'} (-1)^{(n'-n+\lambda)/2} (2\lambda+1) \cdot \left[ \frac{(2n+1)(2n'+1)(\lambda-m+m')!}{n(n+1)n'(n'+1)(\lambda+m-m')!} \right]^{1/2} \cdot \begin{bmatrix} n & n' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} n & n' & \lambda \\ m & -m' & -m+m' \end{bmatrix} \cdot [n(n+1)+n'(n'+1)-\lambda(\lambda+1)] \cdot Z_n(ka) P_{\lambda}^{m-m'}(\cos \eta) \quad (B.6)$$

$$D_{mn, m'n'} = \frac{1}{2} (-1)^{m'} \sum_{\lambda=|n-n'|+1}^{n+n'} i^{(n'-n+\lambda)} (2\lambda+1) \cdot$$

$$\cdot \left[ \frac{(2n+1)(2n'+1)(\lambda-m+m')!}{n(n+1)n'(n'+1)(\lambda+m-m')!} \right]^{1/2} \cdot \begin{bmatrix} n & n' & \lambda-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} n & n' & \lambda \\ m & -m' & -m+m' \end{bmatrix} \cdot \\ \cdot [(\lambda^2 - (n-n')^2)((n+n'+1)^2 - \lambda^2)] \cdot Z_n(ka) P_\lambda^{m-m'}(\cos\eta) \quad ,$$

donde la función radial  $Z_n(ka)$  se ajusta a  $j_n(ka)$  o  $h_n^{(1)}(ka)$  según se requiera. Se debe agregar que el símbolo 3-j de Wigner es dado por

(B.8)

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix} = (-1)^{j_1 - j_2 - m_3} \cdot \delta(m_1 + m_2, -m_3) \cdot$$

$$\left[ \frac{(j_1 + j_2 - j_3)! (j_1 - m_1)! (j_2 - m_2)! (j_3 - m_3)! (j_3 + m_3)!}{(j_1 + j_2 + j_3 + 1)! (j_1 - j_2 + j_3)! (-j_1 + j_2 + j_3)! (j_1 + m_1)! (j_2 + m_2)!} \right]^{1/2} \cdot$$

$$\sum_s (-1)^{s+j_1-m_1} \cdot \frac{(j_1 + m_1 + s)! (j_2 + j_3 - m_1 - s)!}{s! (j_1 - m_1 - s)! (j_3 + m_3 - s)! (j_2 - j_3 + m_1 + s)!} \quad ,$$

donde la suma se realiza sobre valores de "s" que mantengan como no negativos los factoriales involucrados.

APENDICE C. PROGRAMA PARA EVALUAR EL CAMPO RESULTANTE DE LA  
ONDA INCIDENTE PLANA Y LA DISPERSADA.

La polarización es especificada mediante "pol" siendo 1 para la paralela y 2 para la vertical. La incidencia se define por los ángulos "thetpr" y "phipr". Para un valor especificado del ángulo azimutal de observación "phhi", el ángulo polar de observación "theta" se varía entre 0 y 180.

Los archivos "XX1", "XX2" y "XX3" almacenan respectivamente la variación de la intensidad relativa "ee" con el ángulo theta para cada energía "eo" del haz incidente (equivalentemente, para cada matriz "T" leída); el valor máximo de la intensidad relativa y el ángulo polar en que se da y el valor de la intensidad en el ángulo de interés particular "view". Si se pretende obtener el espectro de un dispersor "XX=TT"; para un dispersor girado "XX=TR" y si las matrices T a leer corresponden a las de un sistema de dos dispersores "XX=TC". A continuación el listado del programa, el cual se ha implementado en Fortran (Microsoft, versión 4.01).

PROGRAM CAMPO

```

c-----c
c   Calculo de la Magnitud del campo electromagnetico en c
c   funcion del angulo polar theta, una vez leida T .... c
c-----c
complex*16 atsmn(126),psi(3,126),t(126,126),ftsmn(126)
complex*16 cmp(3,126),e1,e2,e3,p,fhu,re,ffhu,fre,ii,no
real*8 angulo,fact,dfact,gema,fi,ele,bessel,rx,view
real*8 pi,me,gamn,c,ee,x,sen,tr,r,a,b,ko,phhi,rh,d
real*8 eview,yyy
real*8 fgema,ffi,xpr,senpr,thetpr,phipr,ge,r0,dummy
real*8 lambda,xhipr,shipr,eo,cmax,bbb
integer*4 ci,cj,n,nmax,m,sig,tau,as,i,j,k,il,ciclo
integer*4 np,ang1,ang2,step,theta,pol,pos,cbs,obs,tttc
integer*4 clave,aaa,flag,fnd,xxx

```

```

character*12 polar,IDENT,archivo,f11,f12,f13
c-----c
c          NMAX          DIMENSION
c          1             6
c          2             16
c          3             30
c          4             48
c          5             70
c          6             96
c          7            126
c          8            160
c          9            198
c          10           240
c          11           286
c-----c
pi=3141592653589793.2385d-15
ii=(0.0d0,1.0d0)
c-----c
open(5,file='CAMPO.PRT',status='old')
read(5,35) pol
READ(5,35) OBS
READ(5,35) CBS
read(5,25) thetpr
read(5,25) phipr
read(5,25) phhi
read(5,35) angl
read(5,35) ang2
read(5,35) step
read(5,25) view
READ(5,25) RH
read(5,35) tttc
close(5)
c-----c
if(tttc.eq.1) then
  f11='ct1'
  f12='ct2'
  f13='ct3'
else if(tttc.eq.2) then
  f11='cc1'
  f12='cc2'
  f13='cc3'
else
  f11='cr1'
  f12='cr2'
  f13='cr3'
endif
c-----c
phhi=phhi*pi/180.0d0
thetpr=thetpr*pi/180.0d0
xpr=dcos(thetpr)
senpr=dsqrt(1.0d0-xpr*xpr)

```



```

c      -- Polarizacion paralela CON POL=1. Se evaluan los
c      coeficientes de la onda plana incidente mediante las
c      relaciones (5.59a) y (5.59c)
c      -----
c      polar='PARALELA'
c      if(pol.eq.1) then
c          if((tau.eq.1).and.(sig.eq.1)) then
c              if(m.ne.0) then
c                  atsmn(ci)=ii**n*c*4.0d0*m*fi(n,m,xpr,senpr)*xphipr
c              endif
c          endif
c          if((tau.eq.1).and.(sig.eq.-1)) then
c              if(m.ne.0) then
c                  atsmn(ci)=-ii**n*c*4.0d0*m*fi(n,m,xpr,senpr)*sphipr
c              endif
c          endif
c          if((tau.eq.2).and.(sig.eq.-1)) then
c              if(m.eq.0) then
c                  atsmn(ci)=ii**(n+1)*c*4.0d0*senpr*fi(n,m+1,xpr,senpr)*xphipr
c              else
c                  atsmn(ci)=-ii**(n+1)*c*4.0d0*(m*xpr*fi(n,m,xpr,senpr)-
+                  senpr*fi(n,m+1,xpr,senpr))*xphipr
c              endif
c          endif
c          if((tau.eq.2).and.(sig.eq.1)) then
c              if(m.eq.0) then
c                  atsmn(ci)=ii**(n+1)*c*4.0d0*senpr*fi(n,m+1,xpr,senpr)*sphipr
c              else
c                  atsmn(ci)=-ii**(n+1)*c*4.0d0*(m*xpr*fi(n,m,xpr,senpr)-
+                  senpr*fi(n,m+1,xpr,senpr))*sphipr
c              endif
c          endif
c      else
c      -----
c      -- Polarizacion vertical CON POL=2 O DIFERENTE DE 1
c      Se evaluan los coeficientes de la onda plana inciden
c      te mediante las ecuaciones (5.59d) y (5.59e).
c      -----
c      polar='VERTICAL'
c      if((tau.eq.1).and.(sig.eq.-1)) then
c          if(m.eq.0) then
c              atsmn(ci)=ii**n*c*4.0d0*senpr*fi(n,m+1,xpr,senpr)*xphipr
c          else
c              atsmn(ci)=-ii**n*c*4.0d0*(m*xpr*fi(n,m,xpr,senpr)-
+              senpr*fi(n,m+1,xpr,senpr))*xphipr
c          endif
c      endif
c      if((tau.eq.1).and.(sig.eq.1)) then
c          if(m.eq.0) then
c              atsmn(ci)=ii**n*c*4.0d0*senpr*fi(n,m+1,xpr,senpr)*sphipr
c          else

```

```

+          atsmn(ci)=-ii**n*c*4.0d0*(m*xpr*fi(n,m,xpr,senpr)-
          senpr*fi(n,m+1,xpr,senpr))*sphi pr
          endif
        endif
        if((tau.eq.2).and.(sig.eq.1)) then
          if(m.ne.0) then
149      atsmn(ci)=-ii**(n+1)*c*4.0d0*m*fi(n,m,xpr,senpr)*xphi pr
          endif
        endif
        if((tau.eq.2).and.(sig.eq.-1)) then
          if(m.ne.0) then
152      atsmn(ci)=ii**(n+1)*c*4.0d0*m*fi(n,m,xpr,senpr)*sphi pr
          endif
        endif
      endif
149    continue
c-----
c    Se calculan los coeficientes de la expansion del cam
c    po dispersado, utilizando la ecuacion (5.26).
c-----
      do 152 i=1,as
        ftsmn(i)=(0.0d0,0.0d0)
        do 152 j=1,as
          ftsmn(i)=ftsmn(i)+t(i,j)*atsmn(j)
152    continue
      IF(IDENT.EQ.'      CLUSTER') THEN
        OPEN(3,FILE='CLUSTER.PRT',STATUS='OLD')
        READ(3,666) DUMMY
        READ(3,666) DUMMY
        READ(3,666) D
        CLOSE(3)
        CALL RMAX(b,a,D,RO)
      ELSE
        RO=A
        IF(B.GT.RO) RO=B
      ENDIF
      DO 53 I1=1,OBS
        R=RO+(I1-1)*RH
        IF(ANG1.NE.ANG2) THEN
WRITE(13,82) eo,pol,r,thetpr*180./pi,phi pr*180./pi,phhi*180./pi
        END IF
c-----
c    SE CALCULA LA INTENSIDAD ...
c-----
        CMAX=0.0D0
        eview=0.0d0
        flag=1
890      do 65 theta=ang1,ang2,step
          angulo=theta*pi/180.0d0
          x=dcos(angulo)
          sen=dsqrt(1.0d0-x*x)

```

```

tr=ko*r
ci=0
do 150 n=1,nmax
  do 150 m=0,n
    do 150 sig=-1,1,2
      do 150 tau=1,2
        if((m.eq.0).and.(sig.eq.1)) goto 150
        ci=ci+1
        if(m.eq.0) then
          me=1.0d0
        else
          me=2.0d0
        endif
      endif
    endif
  gamn=(me*(2.0d0*n+1.0d0)*fact(n-m))/(4.0d0*n*(n+1)*fact(n+m))
  c=dsqrt(gamn)
c -----
c Utilizando las ecuaciones (5.11) y (5.12) se evaluan
c las componentes radial, polar y azimutal de la enesi
c ma solucion elemental
c -----
      if(tau.eq.1) then
        ffhu=fhu(n,tr)
        psi(1,ci)=(0.0d0,0.0d0)
        if(m.eq.0) then
          psi(2,ci)=(0.0d0,0.0d0)
        else
          psi(2,ci)=c*m*gema(sig,m,phhi)*ffhu*fi(n,m,x,sen)
        endif
      psi(3,ci)=sig*c*gema(-sig,m,phhi)*ffhu*ele(n,m,x,sen)
      else
        fgema=gema(-sig,m,phhi)
        fre=re(n,tr)
        psi(1,ci)=sig*c*fgema*fhu(n,tr)*ge(n,m,x,sen)/tr
        psi(2,ci)=-sig*c*fgema*fre*ele(n,m,x,sen)
        if(m.eq.0) then
          psi(3,ci)=(0.0d0,0.0d0)
        else
          psi(3,ci)=c*m*gema(sig,m,phhi)*fre*fi(n,m,x,sen)
        endif
      endif
      continue
150
c -----
c se determina el campo resultante como la suma del
c incidente y del dispersado
c -----
      do 5 k=1,as
        do 5 j=1,3
          cmp(j,k)=atsmn(k)*DREAL(psi(j,k))+ftsmn(k)*psi(j,k)
5          continue
          e1=(0.0d0,0.0d0)
          e2=(0.0d0,0.0d0)

```

```

e3=(0.0d0,0.0d0)
do 7 i=1,as
  e1=e1+cmp(1,i)
  e2=e2+cmp(2,i)
  e3=e3+cmp(3,i)
7  continue
ee=cdabs(e1)**2+cdabs(e2)**2+cdabs(e3)**2
if((mod((flag+1),2).eq.0).and.(clave.ne.2)) then
  xxx=theta
  yyy=ee
  clave=1
endif
if(mod((flag+2),2).eq.0) then
  aaa=theta
  bbb=ee
  clave=2
endif
if(view.eq.float(theta)) eview=ee
if(ee.gt.cmax) then
  cmax=ee
  pos=theta
endif
if((clave.eq.2).and.(mod((flag+3),2).eq.0)) then
  write(13,208) xxx,yyy,aaa,bbb,theta,ee
  clave=0
  flag=flag-1
else if(theta.eq.ang2) then
  write(13,111) theta,ee
endif
IF(ANG1.EQ.ANG2) GOTO 53
flag=flag+1
65  CONTINUE
IF(I1.EQ.CBS) THEN
  write(39,202) eo,cmax,pos
  write(41,202) eo,eview,int(view)
ENDIF
53  CONTINUE
888 continue
CLOSE(13)
close(39)
close(41)

C -----
c Listado de formatos para entrada y salida
c -----
3  format(i3,1x,i3,1x,e26.20e2,1x,e26.20e2)
25 format(f12.6)
35 FORMAT(I12)
37 format(5x,a12,2x,f10.4)
93 format(5x,3(i10,2x),2(f10.4,2x))
45 FORMAT(F12.6,F12.6)
55 FORMAT(/A12)

```

```

82   format(/5x,f7.4,5x,i5,5x,f7.4,3(5x,f7.3))
111  format(5x,i10,f15.5)
200  format(26x,i5,5x,e10.5e2)
202  FORMAT(1X,F12.6,1X,E12.6E3,1X,I12)
204  FORMAT(E12.6E2)
206  FORMAT(E12.6E2,1X,E12.6E2)
208  format(5x,3(i10,f15.5))
666  FORMAT(E25.15E2)
c    -----
      end
c    -----
COMPLEX*16 FUNCTION FHU(N,W)
integer*4 n
real*8 w,bessel,eu
      fhu=bessel(n,w)+(0.0d0,1.0d0)*eu(n,w)
return
end
c    -----
REAL*8 FUNCTION ELE(N,M,X,SEN)
integer*4 n,m
real*8 x,sen,fi
if(m.eq.0) then
      ele=-fi(n,m+1,x,sen)*sen
else
      ele=m*fi(n,m,x,sen)*x-fi(n,m+1,x,sen)*sen
endif
return
end
c    -----
REAL*8 FUNCTION GE(N,M,X,SEN)
real*8 sen,x,fi
integer*4 n,m
if(m.eq.0) then
      ge=fi(n,m+2,x,sen)*sen-2.0d0*(m+1)*x*fi(n,m+1,x,sen)
else
      ge=fi(n,m+2,x,sen)*sen-2.0d0*(m+1)*x*fi(n,m+1,x,sen)-
+      m*(m+1)*fi(n,m,x,sen)*sen
endif
return
end
c    -----
COMPLEX*16 FUNCTION RE(N,W)
complex*16 h0,h1,h2
real*8 w,bessel,eu
integer*4 n
h0=dcmplx(bessel(n-1,w),eu(n-1,w))
h1=dcmplx(bessel(n,w),eu(n,w))
h2=dcmplx(bessel(n+1,w),eu(n+1,w))
re=n*h0/(2*n+1)+h1/w-(n+1)*h2/(2*n+1)
return
end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION RX(N,W)
integer*4 n
real*8 w,bessel
rx=n*bessel(n-1,w)/(2*n+1)+bessel(n,w)/w-(n+1)*
+bessel(n+1,w)/(2*n+1)
return
end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION BESSEL(N,W)
integer*4 n,m
real*8 A1,A3,dfact,fact,w,perf,porf,marg,b
if(n.eq.0) then
  bessel=dsin(w)/w
else if(n.eq.1) then
  bessel=dsin(w)/w**2-dcos(w)/w
else
  m=-1
  perf=0.0d0
  b=0.5d0*w*w
50  m=m+1
  marg=(-b)**m/(fact(m)*dfact(2*n+2*m+1))
  porf=perf
  perf=perf+marg
  a3=porf-perf
  a1=dabs(a3/perf)
  if(a1.le.1.0d-5) goto 100
  goto 50
100 bessel=w**n*perf
endif
200 return
end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION EU(N,W)
integer*4 n,m
real*8 w,f(20)
f(1)=-dcos(w)/w
f(2)=-dcos(w)/w**2-dsin(w)/w
if(n.eq.0) then
  eu=f(1)
else if(n.eq.1) then
  eu=f(2)
else
  do 10 m=3,n+1
    f(m)=(2*m-3)*f(m-1)/w-f(m-2)
10  continue
  eu=f(n+1)
endif
return
end

```

```

c -----

```

```

REAL*8 FUNCTION FI(N,M,X,SEN)
real*8 x,p(20,20),sen,dfact
integer*4 i,j,m,n
if((m.eq.0).or.(m.gt.n)) then
    fi=0.0d0
    goto 730
else if(m.eq.n) then
    fi=sen**(n-1)*dfact(2*n-1)
    goto 730
endif
560 if(m.eq.1) then
    p(2,m)=3.0d0*x
    if(n.eq.2) then
        fi=p(n,m)
        goto 730
    endif
endif
p(m-1,m)=0.0d0
p(m,m)=sen**(m-1)*dfact(2*m-1)
do 55 i=m+1,n
    p(i,m)=((2*i-1)*x*p(i-1,m)-(i-1+m)*p(i-2,m))/(i-m)
55 continue
fi=p(n,m)
730 return
end

c -----
REAL*8 FUNCTION DFACT(N)
integer*4 n,j,i,m
dfact=1.0d0
if(n.eq.0) goto 810
if(mod(n,2).eq.0) goto 15
j=(n+1)/2
do 210 i=1,j
    m=2*i-1
    dfact=dfact*m
210 continue
goto 810
15 j=n/2
do 20 i=1,j
    m=2*i
    dfact=dfact*m
20 continue
810 return
end

c -----
REAL*8 FUNCTION FACT(N)
integer*4 n
fact=1.0d0
do 10 i=2,n
    fact=fact*i
10 continue

```

```

return
end
c -----
REAL*8 FUNCTION LFI(N,X,SEN)
integer*4 m,n
real*8 x,sen,f(20)
f(1)=1.0d0/sen
f(2)=x/sen
if(n.eq.0) then
  lfi=f(1)
else if(n.eq.1) then
  lfi=f(2)
else
  do 10 m=3,n+1
    f(m)=((2*m-3)*x*f(m-1)-(m-2)*f(m-2))/(1.0d0*(m-1))
10    continue
    lfi=f(n+1)
  endif
return
end
c -----
REAL*8 FUNCTION GEMA(SIG,M,PHHI)
integer*4 sig,m
real*8 phhi
if(sig.eq.1) then
  gema=dcos(m*phhi)
else if(sig.eq.-1) then
  gema=-dsin(m*phhi)
else
  write(*,10)
endif
return
10 format(/30x,'Que pasa en gema ...')
end
c -----
SUBROUTINE RMAX(A,B,D,RO)
REAL*8 A,B,D,RO,PI,THETA,RPR,X,R
PI=3141592653589793.2385D-15
RO=D+A
IF(A.EQ.B) GOTO 110
DO 100 I=1,90
  THETA=I*PI/180.0D0
  X=DCOS(THETA)
  RPR=A*B/DSQRT(A**2+(B**2-A**2)*X**2)
  R=DSQRT(D**2+RPR**2+2.0D0*D*RPR*X)
  IF(R.GT.RO) RO=R
100 CONTINUE
110 RETURN
END
c -----

```

La figura C.1 muestra información sobre los intervalos de ejecución de los programas implementados: cálculo de la matriz  $T$ , de la matriz  $T$  efectiva de una pareja de dispersores idénticos simétricamente desplazados del origen, y el cálculo de la intensidad del campo eléctrico en el punto especificado; todo ello para una energía o frecuencia de la onda plana incidente y el límite "n" utilizado en las expansiones de los campos electromagnéticos. Los asteriscos se refieren al cálculo para una pareja de esferoides y las cruces para un solo dispersor. Además se incluye información sobre los requerimientos de memoria expresados en Megabytes.

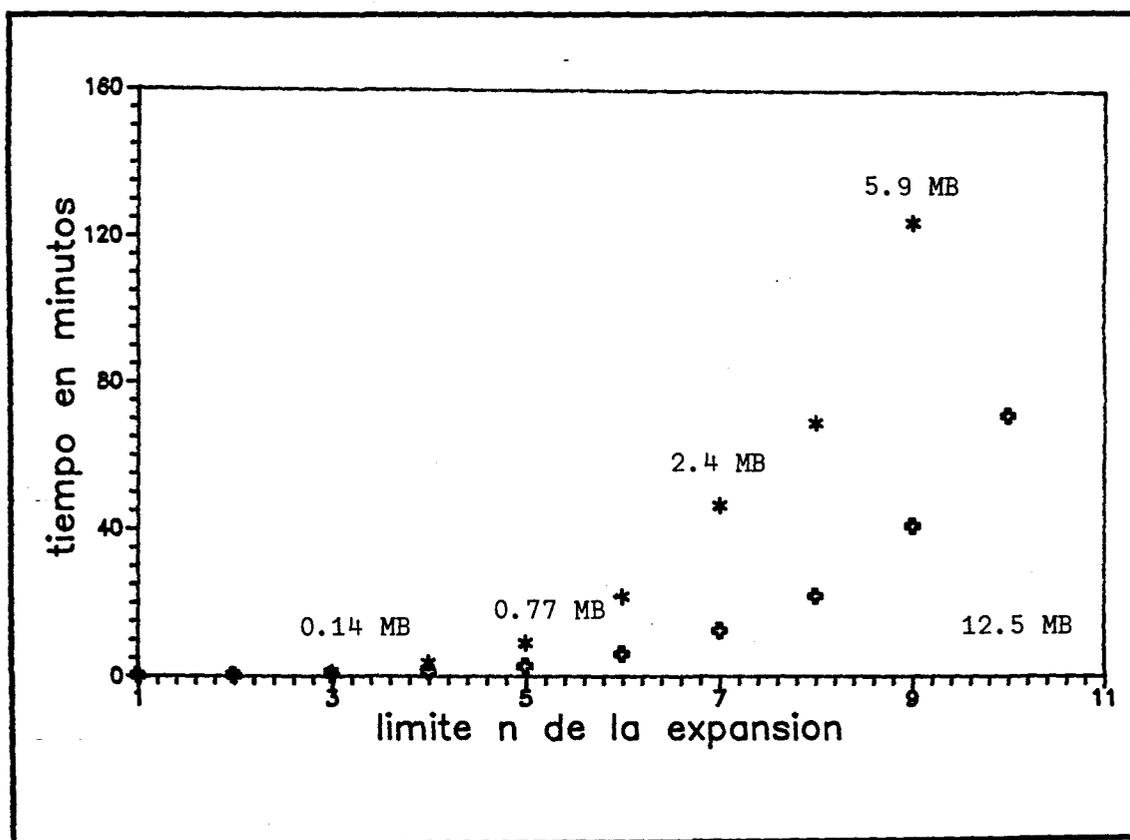


Fig. C.1 Tiempo requerido en el cálculo de la intensidad del campo de un esferoide y de un "cluster" formado por dos elipsoides simétricamente desplazados del origen, utilizando una computadora IBM 4381. No se incluye ejecución de rotación de la matriz de transición.

APENDICE D. PROGRAMA PARA CALCULAR LA MATRIZ DE TRANSICION  
CON DISPERSORES DE FORMA ESFEROIDAL.

Especificada la energía "eo", los semiejes del esferoide "a" y "b", el límite de la expansión "nmax"; se procede a calcular la matriz T, la cual se almacena en el archivo "MT#" cuyo nombre específico ha sido leído desde el archivo de gestión "T1". Para la energía dada, se calcula el índice de refracción complejo "no" utilizando como base los datos experimentales dados por Johnson y Christy (1972) y mediante interpolación por el algoritmo de Neville (Burden y Faires, 1978).

```

PROGRAM MATRIZ
-----c
c Programa para calcular la Matriz T luego de evaluar c
c conjuntamente las matrices Q y REGULAR Q con el esque c
c ma creado en PUERTO RICO, cual es, la lista de matri- c
c ces T a calcular esta contenida en el archivo T1 ... c
c asi como los parametros asociados/W.E. Vargas/U.C.R. c
c -----c
C          NMAX          DIMENSION          |
C          1              6                  |
C          2              16                 |
C          3              30                 |
C          4              48                 |
C          5              70                 | <=====
C          6              96                 |
C          7              126                |
C          8              160                |
C          9              198                |
C          10             240                |
C          11             286                |
C          -----c
C
COMMON /FGH/QINV(70,140)
COMMON AS,ASH
COMMON /IOP/SIG,M,C1,C2,KA,KO,N,U,A,B,DEL,MET
COMPLEX*16 Q1,Q2,INTGR1,INTGR2,KA,KO,C1,C2,PIPHI,NO
COMPLEX*16 QINV,P,R
REAL*8 A,B,GAMN,GAWU,C,ME,EF,DE,DFACT,FACT,PI,EO
INTEGER*4 TAU,SIG,DEL,W,U,N,M,ICLAVE,MIU,NF,CICLO
INTEGER*4 CI,CJ,NMAX,MET,J,K,AS,ASH,TI,TJ,FND
CHARACTER*12 IDENT,ARCHIVO
MET=1
IDENT=' ESFEROIDE'

```

```

PI=3141592653589793.2385d-15
OPEN(6,FILE='T1',STATUS='OLD')
READ(6,39) NF,NMAX,FND,A,B
AS=2*NMAX*(2+NMAX)
ASH=2*AS
IF (A.EQ.B) IDENT='          ESFERA'
DO 888 CICLO=1,NF
  WRITE(*,*) CICLO
  READ(6,37) ARCHIVO,EO
  IF(FND.EQ.1) THEN
    CALL JC(EO,NO)
  ELSE IF(FND.EQ.2) THEN
    CALL DR(EO,NO)
  ELSE IF(FND.EQ.4) THEN
    CALL DIELEC(MET,NO)
  ENDIF
  KO=(2.0d0,0.0d0)*PI*EO/1240.112284d0
  KA=KO*NO
  OPEN(17,FILE='QQ.DAT',STATUS='OLD')
  OPEN(18,FILE='QR.DAT',STATUS='OLD')
  CI=0
  DO 150 N=1,NMAX
    DO 150 M=0,N
      DO 150 SIG=-1,1,2
        DO 150 TAU=1,2
          CJ=0
          IF((M.EQ.0).AND.(SIG.EQ.1)) GOTO 8
          CI=CI+1
8      DO 150 U=1,NMAX
          DO 150 W=0,U
            DO 150 DEL=-1,1,2
              DO 150 MIU=1,2
                Q1=(0.0d0,0.0d0)
                Q2=(0.0d0,0.0d0)
                IF((M.EQ.0).AND.(SIG.EQ.1)) GOTO 150
                IF((W.EQ.0).AND.(DEL.EQ.1)) GOTO 150
                CJ=CJ+1
                IF((A.EQ.B).AND.(CI.NE.CJ)) GOTO 150
                IF(M.NE.W) GOTO 150
                IF(M.EQ.0) THEN
                  ME=1.0d0
                ELSE
                  ME=2.0d0
                END IF
                GAMN=(ME*(2.0d0*N+1.0d0)*FACT(N-M))/(4.0d0*N*(N+1)*fact(N+M))
                GAWU=(ME*(2.0d0*U+1.0d0)*FACT(U-W))/(4.0d0*U*(U+1)*FACT(U+W))
                C=DSQRT(GAMN*GAWU)
                IF((TAU.EQ.1).AND.(MIU.EQ.1)) THEN
                  GOTO 11
                ELSE IF((TAU.EQ.2).AND.(MIU.EQ.2)) THEN
                  GOTO 22
                ELSE IF((TAU.EQ.1).AND.(MIU.EQ.2)) THEN
                  GOTO 12
                ELSE

```

```

          GOTO 21
        END IF
11      IF((SIG.NE.DEL).OR.(MOD((N+U),2).NE.0)) GOTO 150
        C1=PIPHI(-SIG,M,KO)
        C2=PIPHI(SIG,M,KO)
        ICLAVE=11
        CALL ROM(ICLAVE,INTGR1,INTGR2)
        GOTO 100
12      IF((SIG.EQ.DEL).OR.(MOD((N+U),2).EQ.0)) GOTO 150
        C1=PIPHI(SIG,M,KO)
        C2=PIPHI(-SIG,M,KO)
        ICLAVE=12
        CALL ROM(ICLAVE,INTGR1,INTGR2)
        GOTO 100
21      IF((SIG.EQ.DEL).OR.(MOD((N+U),2).EQ.0)) GOTO 150
        C1=PIPHI(SIG,M,KO)
        C2=PIPHI(-SIG,M,KO)
        ICLAVE=21
        CALL ROM(ICLAVE,INTGR1,INTGR2)
        GOTO 100
22      IF((SIG.NE.DEL).OR.(MOD((N+U),2).NE.0)) GOTO 150
        C1=PIPHI(-SIG,M,KO)
        C2=PIPHI(SIG,M,KO)
        ICLAVE=22
        CALL ROM(ICLAVE,INTGR1,INTGR2)
100     Q1=2.ODO*C*INTGR1
        Q2=2.ODO*C*INTGR2
109     IF(CDABS(Q1).NE.0.0) THEN
c -----
c WRITE(*,13) NINTG,N,U,SIG,DEL,M,W,TAU,MIU,Q1,CI,CJ
c -----
        WRITE(17,3) CI,CJ,Q1
        ENDIF
        IF(CDABS(Q2).NE.0.0) THEN
c -----
c WRITE(*,13) NINTG,N,U,SIG,DEL,M,W,TAU,MIU,Q2,CI,CJ
c -----
        WRITE(18,3) CI,CJ,Q2
        ENDIF
150    CONTINUE
        WRITE(17,3) CI+1,CJ+1,2.2e-19,2.2e-19
        WRITE(18,3) CI+1,CJ+1,2.2e-19,2.2e-19
        CLOSE(17)
        CLOSE(18)
        DO 17 I=1,AS
          DO 17 J=1,ASH
            QINV(I,J)=(0.0d0,0.0d0)
17     CONTINUE
        OPEN(17,FILE='QQ.DAT',STATUS='OLD')
155    READ(17,3) TI,TJ,P
        IF((TI.LE.AS).AND.(TJ.LE.AS)) QINV(TI,TJ)=P
        IF(TI.GT.AS) GOTO 166
        GOTO 155
c -----

```

```

c      Se invierte la matriz Q
c      -----
166    IF(A.EQ.B) THEN
        DO 168 I=1,AS
            QINV(I,I+AS)=1.0DO/QINV(I,I)
            QINV(I,I)=(0.0DO,0.0DO)
168    CONTINUE
        ELSE
            CALL MATINV
        ENDIF
        OPEN(18,FILE='QR.DAT',STATUS='OLD')
172    READ(18,3) TI,TJ,P
        IF((TI.LE.AS).AND.(TJ.LE.AS)) QINV(TI,TJ)=P
        IF(TI.GT.AS) GOTO 177
        GOTO 172
177    CLOSE(17)
        CLOSE(18)
        OPEN(19,FILE=ARCHIVO,STATUS='NEW')
        WRITE(19,35) AS
c      -----
c      Se aplica la ecuacion (5.27) para calcular T
c      -----
        IF(A.EQ.B) THEN
            DO 69 I=1,AS
                P=-QINV(I,I+AS)*QINV(I,I)
                WRITE(19,3) I,I,P
69    CONTINUE
            ELSE
                DO 76 I=1,AS
                    DO 76 J=1,AS
                        P=(0.0DO,0.0DO)
                        DO 73 K=1,AS
                            P=P+QINV(I,K+AS)*QINV(K,J)
73    CONTINUE
                        P=-P
                        IF(CDABS(P).NE.0.0DO) THEN
                            WRITE(19,3) I,J,P
                        ENDIF
76    CONTINUE
                    ENDIF
                WRITE(19,3) AS+1,AS+1,2.2e-19,2.2e-19
                WRITE(19,55) IDENT
                WRITE(19,25) A
                WRITE(19,25) B
                WRITE(19,35) NMAX
                WRITE(19,35) MET
                WRITE(19,25) EO
                WRITE(19,45) NO
                CLOSE(19)
888    CONTINUE
        CLOSE(6)
c      -----
3    FORMAT(I3,1X,I3,1X,E26.20E2,1X,E26.20E2)
13   FORMAT(1X,I3,2X,8(I2,2X),1X,E14.8E2,2X,E14.8E2,1X,I3,

```

```

+2X,I3)
25  FORMAT(F12.6)
35  FORMAT(I12)
37  FORMAT(5x,a12,2x,f10.4)
39  FORMAT(5x,3(I10,2X),2(f10.4,2x))
45  FORMAT(F12.6,F12.6)
55  FORMAT(/A12)
220 FORMAT(/2x,'No',3x,'N',3x,'U',2x,'SIG',1x,'DEL',2x,'M'
+ ,3x,'W',2x,
+ 'TAU',1x,'MIU',6x,'REAL ',10x,'IMAG ',7x,'CI',3x,'CJ'/)
C -----
END
C -----
SUBROUTINE MATINV
COMMON /FGH/QINV(70,140)
COMMON AS,ASH
INTEGER*4 AS,ASH,I,J,K
COMPLEX*16 QINV,P
DO 13 I=1,AS
  QINV(I,I+AS)=(1.0d0,0.0d0)
13  CONTINUE
DO 24 K=1,AS-1
  DO 334 I=K,AS
    IF(CDABS(QINV(I,K)).NE.0.0d0) THEN
      DO 333 J=ASH,K,-1
        QINV(I,J)=QINV(I,J)/QINV(I,K)
333      CONTINUE
      END IF
334    CONTINUE
DO 26 I=K+1,AS
  IF(CDABS(QINV(I,K)).NE.0.0d0) THEN
    DO 26 J=ASH,K,-1
      QINV(I,J)=QINV(K,K)*QINV(I,J)-QINV(K,J)*QINV(I,K)
26    CONTINUE
    END IF
24  CONTINUE
DO 53 I=2,AS
  DO 53 J=1,I-1
    QINV(I,J)=(0.0d0,0.0d0)
53  CONTINUE
DO 73 I=1,AS
  DO 73 J=ASH,I,-1
    QINV(I,J)=QINV(I,J)/QINV(I,I)
73  CONTINUE
DO 93 K=1,AS-1
  DO 93 I=1,AS-K
    IF(CDABS(QINV(I,I+K)).NE.0.0d0) THEN
      DO 92 J=ASH,I,-1
        QINV(I,J)=QINV(I,J)-QINV(I+K,J)*QINV(I,I+K)
92      CONTINUE
      END IF
93  CONTINUE
DO 94 I=1,AS
  DO 94 J=1,AS

```

```

          QINV(I,J)=(0.0d0,0.0d0)
94  CONTINUE
    RETURN
    END
c  -----
c  SUBROUTINE INTE1(ICLAVE,X,Y1,Y2)
c  -----c
c  Subrutina que evalua el integrando para Esferoides de c
c  Semieje Ecuatorial A y Semieje polar B c
c  -----c
COMMON /IOP/SIG,M,C1,C2,KA,KO,N,U,A,B,DEL,MET
real*8 felen,feleu,felenu,ele,ge,fi,fiu,r,sr,so
real*8 X,A,B,SEN
integer*4 i,j,k,sig,m,n,u,iclave,del,met
complex*16 y1,y2,aint11,aint21,aint12,aint22,fhu1,fhu2
complex*16 c1,c2,ka,ko,tr,tr1,frx,fbes,bessel,eu,fre,re
complex*16 dummy0,dummy1,dummy2,dummy11,dummy12,reutr1
complex*16 dummy21,dummy22,dummy13,dummy23,rxntr,rx,rxutr1
sen=dsqrt(1.0d0-x*x)
r=a*b/dsqrt((a*a-b*b)*x*x+b*b)
sr=r*r
so=r**4*x*sen*(b*b-a*a)/(a*a*b*b)
tr=ka*r
tr1=ko*r
FHU2=BESSEL(U,TR1)
FHU1=FHU2+(0.0d0,1.0d0)*EU(u,tr1)
fbes=bessel(n,tr)
reutr1=re(u,tr1)
rxutr1=rx(u,tr1)
rxntr=rx(n,tr)
if(iclave.eq.11) goto 11
if(iclave.eq.22) goto 22
if(iclave.eq.12) goto 12
if(iclave.eq.21) goto 21
C  -----
c  Se evaluan los argumentos de las integrales (5.48)
c  -----
11 if(cdabs(c1).eq.0.0d0) goto 112
    feleu=ele(u,m,x,sen)
    felen=ele(n,m,x,sen)
    dummy11=ko*met*fbes*reutr1-ka*rxntr*fhu1
    dummy21=ko*met*fbes*rxutr1-ka*rxntr*fhu2
    dummy2=(1.0d0,0.0d0)*met*ge(u,m,x,sen)*felen -
+   (1.0d0,0.0d0)*ge(n,m,x,sen)*feleu
    dummy13=sr*felen*feleu*dummy11+(so*fbes*fhu1*dummy2)/r
    dummy23=sr*felen*feleu*dummy21+(so*fbes*fhu2*dummy2)/r
    aint11=c1*sig*sig*dummy13
    aint21=c1*sig*sig*dummy23
    if(cdabs(c2).ne.0.0d0) goto 112
    y1=aint11
    y2=aint21
    goto 501
112 felenu=fi(n,m,x,sen)*fi(u,m,x,sen)
    dummy11=ko*met*fbes*reutr1-ka*rxntr*fhu1

```

```

dumy21=ko*met*fbes*rxutr1-ka*rxntr*fhu2
aint12=c2*m*m*sr*felenu*dumy11
aint22=c2*m*m*sr*felenu*dumy21
if(cdabs(c1).ne.0.0d0) goto 113
y1=aint12
y2=aint22
goto 501
113 y1=aint11+aint12
y2=aint21+aint22
goto 501
C -----
c Se evaluan los argumentos de las integrales (5.50)
c -----
12 if(cdabs(c1).eq.0.0d0) goto 122
feleu=sr*ele(u,m,x,sen)
dumy0=ka*ge(u,m,x,sen)/TR1
dumy1=c1*m*del*fi(n,m,x,sen)
dumy11=ka*rxntr*reutr1+ko*met*fbes*fhu1
dumy21=ka*rxntr*rxutr1+ko*met*fbes*fhu2
dumy12=so*rxntr*fhu1*dumy0
dumy22=so*rxntr*fhu2*dumy0
aint11=dumy1*(feleu*dumy11+dumy12)
aint21=dumy1*(feleu*dumy21+dumy22)
if(cdabs(c2).ne.0.0d0) goto 122
y1=aint11
y2=aint21
goto 501
122 felen=sr*ele(n,m,x,sen)
fiu=-c2*sig*m*fi(u,m,x,sen)
dumy1=so*ge(n,m,x,sen)/r
dumy11=ka*rxntr*reutr1+ko*met*fbes*fhu1
dumy21=ka*rxntr*rxutr1+ko*met*fbes*fhu2
dumy12=fbes*reutr1*dumy1
dumy22=fbes*rxutr1*dumy1
aint12=fiu*(felen*dumy11+dumy12)
aint22=fiu*(felen*dumy21+dumy22)
if(cdabs(c1).ne.0.0d0) goto 123
y1=aint12
y2=aint22
goto 501
123 y1=aint11+aint12
y2=aint21+aint22
goto 501
C -----
c Se evaluan los argumentos de las integrales (5.51)
c -----
21 if(cdabs(c1).eq.0.0d0) goto 212
dumy0=met*so*ge(u,m,x,sen)/r
felen=c1*m*del*fi(n,m,x,sen)
dumy1=sr*ele(u,m,x,sen)
dumy11=ka*fbes*fhu1+ko*met*rxntr*reutr1
dumy21=ka*fbes*fhu2+ko*met*rxntr*rxutr1
dumy12=rxntr*fhu1*dumy0
dumy22=rxntr*fhu2*dumy0

```

```

aint11=felen*(dumy1*dumy11+dumy12)
aint21=felen*(dumy1*dumy21+dumy22)
if(cdabs(c2).ne.0.0d0) goto 212
y1=aint11
y2=aint21
goto 501
212 dumy1=ko*met*ge(n,m,x,sen)/TR
fiu=-c2*sig*m*fi(u,m,x,sen)
felen=sr*ele(n,m,x,sen)
dumy11=ka*fbes*fhu1+ko*met*rxntr*reutr1
dumy21=ka*fbes*fhu2+ko*met*rxntr*rxutr1
dumy12=so*fbes*reutr1*dumy1
dumy22=so*fbes*rxutr1*dumy1
aint12=fiu*(felen*dumy11+dumy12)
aint22=fiu*(felen*dumy21+dumy22)
if(cdabs(c1).ne.0.0d0) goto 213
y1=aint12
y2=aint22
goto 501
213 y1=aint11+aint12
y2=aint21+aint22
goto 501
C -----
c Se evaluan los argumentos de las integrales (5.49)
c -----
22 if(cdabs(c1).eq.0.0d0) goto 222
felen=ele(n,m,x,sen)
feleu=sr*ele(u,m,x,sen)
dumy11=ka*fbes*reutr1-ko*met*rxntr*fhu1
dumy21=ka*fbes*rxutr1-ko*met*rxntr*fhu2
dumy2=ka*ge(u,m,x,sen)*felen/ko-ko*met*ge(n,m,x,sen)
+ *feleu/(ka*sr)
dumy13=felen*feleu*dumy11+so*fbes*fhu1*dumy2/r
dumy23=felen*feleu*dumy21+so*fbes*fhu2*dumy2/r
aint11=c1*sig*sig*dumy13
aint21=c1*sig*sig*dumy23
if(cdabs(c2).ne.0.0d0) goto 222
y1=aint11
y2=aint21
goto 501
222 dumy0=c2*m*m*sr*fi(n,m,x,sen)*fi(u,m,x,sen)
dumy11=ka*fbes*reutr1-ko*met*rxntr*fhu1
dumy21=ka*fbes*rxutr1-ko*met*rxntr*fhu2
aint12=dumy0*dumy11
aint22=dumy0*dumy21
if(cdabs(c1).ne.0.0d0) goto 223
y1=aint12
y2=aint22
goto 501
223 y1=aint11+aint12
y2=aint21+aint22
C -----
501 return
end

```

```

c -----
c SUBROUTINE INTEO(ICLAVE,X,Y1,Y2)
c -----c
c Subrutina para evaluar el Integrando para esfera de c
c radioA. Iclave solo toma los valores 11 y 22 pues en c
c este caso los multipolos electricos y magneticos es- c
c tan desacoplados.
c -----c
COMMON /IOP/SIG,M,C1,C2,KA,KO,N,U,A,B,DEL,MET
real*8 felen,feleu,felenu,ele,ge,fi,fiu,sr,X,A,B,SEN
integer*4 i,j,k,sig,m,n,u,iclave,del,met
complex*16 y1,y2,aint11,aint21,aint12,aint22,fhu1,fhu2
complex*16 c1,c2,ka,ko,tr,tr1,frx,fbes,bessel,eu,fre,re
complex*16 dumy0,dumy1,dumy2,dumy11,dumy12,reutr1
complex*16 dumy21,dumy22,dumy13,dumy23,rxntr,rx,rxutr1
sen=dsqrt(1.0d0-x*x)
sr=a*a
tr=ka*a
tr1=ko*a
FHU2=BESSEL(U,TR1)
FHU1=FHU2+(0.0d0,1.0d0)*EU(u,tr1)
fbes=bessel(n,tr)
reutr1=re(u,tr1)
rxutr1=rx(u,tr1)
rxntr=rx(n,tr)
if(iclave.eq.11) goto 11
if(iclave.eq.22) goto 22
-----
c Se evaluan los argumentos de las integrales (5.48)
c -----
11 if(cdabs(c1).eq.0.0d0) goto 112
   feleu=ele(u,m,x,sen)
   felen=ele(n,m,x,sen)
   dumy11=ko*met*fbes*reutr1-ka*rxntr*fhu1
   dumy21=ko*met*fbes*rxutr1-ka*rxntr*fhu2
   dumy2=(1.0d0,0.0d0)*met*ge(u,m,x,sen)*felen -
+ (1.0d0,0.0d0)*ge(n,m,x,sen)*feleu
   dumy13=sr*felen*feleu*dumy11
   dumy23=sr*felen*feleu*dumy21
   aint11=c1*sig*sig*dumy13
   aint21=c1*sig*sig*dumy23
   if(cdabs(c2).ne.0.0d0) goto 112
   y1=aint11
   y2=aint21
   goto 501
112 felenu=fi(n,m,x,sen)*fi(u,m,x,sen)
   dumy11=ko*met*fbes*reutr1-ka*rxntr*fhu1
   dumy21=ko*met*fbes*rxutr1-ka*rxntr*fhu2
   aint12=c2*m*m*sr*felenu*dumy11
   aint22=c2*m*m*sr*felenu*dumy21
   if(cdabs(c1).ne.0.0d0) goto 113
   y1=aint12
   y2=aint22
   goto 501

```

```

113   y1=aint11+aint12
      y2=aint21+aint22
      goto 501
C -----
c   Se evaluan los argumentos de las integrales (5.49)
c -----
22  if(cdabs(c1).eq.0.0d0) goto 222
      felen=ele(n,m,x,sen)
      feleu=sr*ele(u,m,x,sen)
      dumy11=ka*fbes*reutr1-ko*met*rxntr*fhu1
      dumy21=ka*fbes*rxutr1-ko*met*rxntr*fhu2
      dumy2=ka*ge(u,m,x,sen)*felen/ko-ko*met*ge(n,m,x,sen)
+   *feleu/(ka*sr)
      dumy13=felen*feleu*dumy11
      dumy23=felen*feleu*dumy21
      aint11=c1*sig*sig*dumy13
      aint21=c1*sig*sig*dumy23
      if(cdabs(c2).ne.0.0d0) goto 222
      y1=aint11
      y2=aint21
      goto 501
222  dumy0=c2*m*m*sr*fi(n,m,x,sen)*fi(u,m,x,sen)
      dumy11=ka*fbes*reutr1-ko*met*rxntr*fhu1
      dumy21=ka*fbes*rxutr1-ko*met*rxntr*fhu2
      aint12=dumy0*dumy11
      aint22=dumy0*dumy21
      if(cdabs(c1).ne.0.0d0) goto 223
      y1=aint12
      y2=aint22
      goto 501
223  y1=aint11+aint12
      y2=aint21+aint22
C -----
501  return
      end
c -----
      COMPLEX*16 FUNCTION PIPHI(J,M,KO)
      integer*4 i,j,m
      complex*16 ko
      piphi=(0.0d0,0.0d0)
      if(m.ne.0) then
         piphi=ko
      else if(j.eq.1) then
         piphi=2.0d0*ko
      end if
      return
      end
c -----
      REAL*8 FUNCTION ELE(N,M,X,SEN)
      integer*4 n,m
      real*8 x,sen,fi
         ele=m*fi(n,m,x,sen)*x-fi(n,m+1,x,sen)*sen
      return
      end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION GE(N,M,X,SEN)
real*8 sen,x,fi
integer*4 n,m
ge=fi(n,m+2,x,sen)*sen-2.0d0*(m+1)*x*fi(n,m+1,x,sen)-
+m*(m+1)*fi(n,m,x,sen)*sen
return
end
c -----
COMPLEX*16 FUNCTION RE(N,W)
COMPLEX*16 HO,H1,H2
COMPLEX*16 W,BESSEL,EU
INTEGER*4 N
HO=BESSEL(N-1,W)+(0.0d0,1.0d0)*EU(N-1,W)
H1=BESSEL(N,W)+(0.0d0,1.0d0)*EU(N,W)
H2=BESSEL(N+1,W)+(0.0d0,1.0d0)*EU(N+1,W)
RE=N*HO/(2*N+1)+H1/W-(N+1)*H2/(2*N+1)
RETURN
END
C -----
COMPLEX*16 FUNCTION RX(N,W)
INTEGER*4 N
COMPLEX*16 W,BESSEL
RX=N*BESSEL(N-1,W)/(2*N+1)+BESSEL(N,W)/W-(N+1)*
+BESSEL(N+1,W)/(2*N+1)
RETURN
END
c -----
COMPLEX*16 FUNCTION BESSEL(N,W)
integer*4 n,m
real*8 a1,a2,a3,a4,fh1,gh1,fh2,gh2,dfact,fact
complex*16 w,perf,porf,marg,b
if(n.eq.0) then
    bessel=cdsin(w)/w
else if(n.eq.1) then
    bessel=cdsin(w)/w**2-cdcos(w)/w
else
    m=-1
    perf=(0.0d0,0.0d0)
    b=0.5d0*w*w
50    m=m+1
    marg=(-b)**m/(fact(m)*dfact(2*n+2*m+1))
    porf=perf
    perf=perf+marg
    fh1=dreal(porf)
    gh1=dreal(perf)
    FH2=DIMAG(PORF)
    gh2=dimag(perf)
    a3=fh1-gh1
    A4=FH2-GH2
    a1=dabs(a3/gh1)
    IF(GH2.NE.0.0D0) THEN
        A2=DABS(A4/GH2)
    ELSE

```

```

          A2=0.0D0
        ENDIF
        if((a1.LE.1.0d-5).AND.(A2.LE.1.0D-5)) GOTO 100
        GOTO 50
100      bessel=w**n*perf
        endif
999      return
        end

```

```

C -----
COMPLEX*16 FUNCTION EU(N,W)
INTEGER*4 N,M
COMPLEX*16 W,F(20)
F(1)=-CdCOS(W)/W
F(2)=-CdCOS(W)/W**2-CdSIN(W)/W
IF(N.LE.1) THEN
  EU=F(N+1)
ELSE
  DO 10 M=3,N+1
    F(M)=(2*M-3)*F(M-1)/W-F(M-2)
10  CONTINUE
  EU=F(N+1)
END IF
RETURN
END

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION FI(N,M,X,SEN)
real*8 x,p(20,20),sen,dfact
integer*4 i,j,m,n
if((m.eq.0).or.(m.gt.n)) then
  fi=0.0d0
  goto 730
else if(m.eq.n) then
  fi=sen**(n-1)*dfact(2*n-1)
  goto 730
endif
560 if(m.eq.1) then
  p(2,m)=3.0d0*x
  if(n.eq.2) then
    fi=p(n,m)
    goto 730
  endif
endif
p(m-1,m)=0.0d0
p(m,m)=sen**(m-1)*dfact(2*m-1)
do 55 i=m+1,n
  p(i,m)=((2*i-1)*x*p(i-1,m)-(i-1+m)*p(i-2,m))/(i-m)
55 continue
fi=p(n,m)
730 return
end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION DFACT(N)
integer*4 n,j,i,k
dfact=1.0d0

```

```

      if(n.eq.0) goto 810
      if(mod(n,2).eq.0) goto 15
      j=(n+1)/2
      do 210 i=1,j
         k=2*i-1
         dfact=dfact*k
210    continue
      goto 810
      15 j=n/2
      do 20 i=1,j
         k=2*i
         dfact=dfact*k
      20 continue
810    return
      end

```

```

c -----
      REAL*8 FUNCTION FACT(N)
      integer*4 n
      fact=1.0d0
      do 10 i=2,n
         fact=fact*i
10     continue
      return
      end

```

```

c -----
      SUBROUTINE ROM(ICLAVE,INTGR1,INTGR2)
      COMMON /IOP/SIG,M,C1,C2,KA,KO,N,U,A,B,DEL,MET
      complex*16 y1,y2,intgr1,intgr2,r1(2,20),r2(2,20)
      complex*16 sum1,sum2,f1a,f1b,f2a,f2b,c1,c2,ka,ko,Z0
      integer*4 i,j,k,itmax,sig,m,u,n,iclave,del,met
      real*8 x,low,up,h,a,b,pi,z1r,z1i,z2r,z2i
      itmax=50
      Z0=(0.0d0,0.0d0)
      low=0.0d0
      up=1.0d0
      H=UP-LOW
      intgr1=(0.0d0,0.0d0)
      INTGR2=(0.0d0,0.0d0)
      IF(A.EQ.B) THEN
         CALL INTE0(ICLAVE,LOW,F1A,F2A)
         CALL INTE0(ICLAVE,UP,F1B,F2B)
      ELSE
         CALL INTE1(ICLAVE,LOW,F1A,F2A)
         CALL INTE1(ICLAVE,UP,F1B,F2B)
      ENDIF
      r1(1,1)=0.50d0*h*(f1a+f1b)
      R2(1,1)=0.50d0*H*(F2A+F2B)
      do 700 i=2,itmax
         sum1=(0.0d0,0.0d0)
         SUM2=(0.0d0,0.0d0)
         do 620 k=1,2**(i-2)
            x=low+(1.0d0*k-0.5d0)*h
            IF(A.EQ.B) THEN
               CALL INTE0(ICLAVE,X,Y1,Y2)

```

```

        ELSE
          CALL INTE1(ICLAVE,X,Y1,Y2)
        ENDIF
        sum1=sum1+y1
        SUM2=SUM2+Y2
620      continue
        R1(2,1)=0.5000*(R1(1,1)+H*SUM1)
        R2(2,1)=0.5000*(R2(1,1)+H*SUM2)
C      -----
        do 640 J=2,I
R1(2,J)=(2**(2*(J-1))*R1(2,J-1)-R1(1,J-1))/(2**(2*(J-1))-1)
R2(2,J)=(2**(2*(J-1))*R2(2,J-1)-R2(1,J-1))/(2**(2*(J-1))-1)
          IF((I.EQ.ITMAX).AND.(J.EQ.I)) GOTO 649
          IF((R1(2,J).EQ.ZO).AND.(R2(2,J).EQ.ZO)) THEN
            IF(I.LT.3) GOTO 640
            GOTO 633
          ENDIF
          IF((DREAL(R1(2,J)).EQ.0.0).OR.(DIMAG(R1(2,J)).EQ.0.0)) THEN
            Z1R=0.000
            Z1I=0.000
          ELSE
            Z1R=(DREAL(R1(2,J))-DREAL(R1(2,J-1)))/DREAL(R1(2,J))
            Z1I=(DIMAG(R1(2,J))-DIMAG(R1(2,J-1)))/DIMAG(R1(2,J))
          ENDIF
          IF((DREAL(R2(2,J)).EQ.0.0).OR.(DIMAG(R2(2,J)).EQ.0.0)) THEN
            Z2R=0.000
            Z2I=0.000
          ELSE
            Z2R=(DREAL(R2(2,J))-DREAL(R2(2,J-1)))/DREAL(R2(2,J))
            Z2I=(DIMAG(R2(2,J))-DIMAG(R2(2,J-1)))/DIMAG(R2(2,J))
          ENDIF
          if((dabs(z1r).gt.1.0D-5).or.(dabs(z1i).gt.1.0D-5)) goto 640
          IF((DABS(Z2R).GT.1.0D-5).OR.(DABS(Z2I).GT.1.0D-5)) GOTO 640
633      INTGR1=R1(2,J)
          INTGR2=R2(2,J)
          GOTO 900
640      CONTINUE
C      -----
          IF((R1(2,I).EQ.ZO).AND.(R2(2,I).EQ.ZO)) THEN
            IF(I.LT.3) GOTO 650
            GOTO 649
          ENDIF
          IF((DREAL(R1(2,I)).eq.0.0).OR.(DIMAG(R1(2,I)).EQ.0.0)) THEN
            Z1R=0.000
            Z1I=0.000
          ELSE
            Z1R=(DREAL(R1(2,I))-DREAL(R1(1,I-1)))/DREAL(R1(2,I))
            Z1I=(DIMAG(R1(2,I))-DIMAG(R1(1,I-1)))/DIMAG(R1(2,I))
          ENDIF
          IF((DREAL(R2(2,I)).EQ.0.0).OR.(DIMAG(R2(2,I)).EQ.0.0)) THEN
            Z2R=0.000
            Z2I=0.000
          ELSE
            Z2R=(DREAL(R2(2,I))-DREAL(R2(1,I-1)))/DREAL(R2(2,I))

```

```

                Z2I=(DIMAG(R2(2,I))-DIMAG(R2(1,I-1)))/DIMAG(R2(2,I))
                ENDIF
if((dabs(z1r).gt.1.0D-3).or.(dabs(z1i).gt.1.0D-3)) goto 650
IF((DABS(Z2R).GT.1.0D-3).OR.(DABS(Z2I).GT.1.0D-3)) GOTO 650
649   INTGR1=R1(2,I)
      INTGR2=R2(2,I)
      GOTO 900
650   h=0.5d0*h
      DO 660 j=1,i
        R1(1,J)=R1(2,J)
        R2(1,J)=R2(2,J)
660   CONTINUE
700 CONTINUE
900 RETURN
      END
c -----
SUBROUTINE JC(E0,NO)
INTEGER*4 I,J,K,NI,NF,CP
REAL*8 E0,X(50),Y(50),Q(8,8),EY(2)
COMPLEX*16 NO
NR=49
CP=1
OPEN(7,FILE='JCREALN.PRT',STATUS='OLD')
099 DO 222 I=1,NR
      X(I)=0.0D0
      Y(I)=0.0D0
222 CONTINUE
      DO 333 I=1,NR
        READ(7,*) X(I),Y(I)
333 CONTINUE
      CLOSE(7)
      IF((EO.LT.X(1)).OR.(EO.GT.X(NR))) THEN
        WRITE(*,*) '----- ENERGIA FUERA DEL RANGO ADMISIBLE
        STOP
      ENDIF
      DO 444 J=1,NR
        IF(EO.EQ.X(J)) THEN
          EY(CP)=Y(J)
          GOTO 350
        END IF
444 CONTINUE
      IF(EO.LT.X(2)) THEN
        NI=1
        NF=2
        N=2
        GOTO 150
      END IF
      IF(EO.GT.X(NR-1)) THEN
        NI=NR-1
        NF=NR
        N=2
        GOTO 150
      END IF
      DO 555 J=2,NR-2

```

```

                IF((X(J).LT.EO).AND.(EO.LT.X(J+1))) THEN
                    NI=J-1
                    NF=J+2
                    N=NF+1-NI
                    GOTO 150
                END IF
555 CONTINUE
150 DO 166 K=1,N
    Q(K,1)=Y(NI+K-1)
166 CONTINUE
    DO 177 I=2,N
        DO 177 J=2,I
            X1=X(I-J+NI)
            X2=X(I+NI-1)
            Q(I,J)=((EO-X1)*Q(I,J-1)-(EO-X2)*Q(I-1,J-1))/(X2-X1)
177 CONTINUE
    EY(CP)=Q(N,N)
350 CP=CP+1
    IF(CP.GT.2) GOTO 999
    OPEN(7,FILE='JCIMAGK.PRT',STATUS='OLD')
    GOTO 099
999 NO=DCMPLX(EY(1),EY(2))
    RETURN
    END

```

```

c -----
c SUBROUTINE DR(EO,NO)
c -----c
c Se establece la Funcion Dielectrica, el Indice de Re- c
c fracion n y el Coeficiente de Atenuacion k para el me c
c tal. Los parametros han sido especificados en el ar c
c chivo Drude.prt c
c -----c
REAL*8 T,N,M,E,H,W,WP,E1,E2,NN,KK,PI,MEL,RR,EO
COMPLEX*16 NO
PI=3141592653589793.2385D-15
E=4.803D-10
M=9.110D-28
H=1.054D-27
OPEN(7,FILE='DRUDE.PRT',STATUS='OLD')
READ(7,11) T
READ(7,11) N
READ(7,11) MEL
CLOSE(7)
M=MEL*M
W=EO*1.602D-12/H
WP=DSQRT(4.00D*PI*N*E/M)
WT=W*T
WPT=WP*T
E1=1.00D-WPT**2/(1.00D+WT**2)
E2=WPT**2/(WT*(1.00D+WT**2))
RR=DSQRT(E1**2+E2**2)
NN=DSQRT(0.50D*(RR+E1))
KK=DSQRT(0.50D*(RR-E1))
NO=DCMPLX(NN,KK)

```

```
11 RETURN
   FORMAT(E12.6E2)
   END
C -----
  SUBROUTINE DIELEC(MET,NO)
  INTEGER*4 MET
  REAL*8 E1,E2,NN,KK
  COMPLEX*16 NO
  MET=0
  OPEN(3,FILE='DIELEC.PRT',STATUS='OLD')
  READ(3,13) E1
  CLOSE(3)
  E2=0.0D0
  NN=DSQRT(E1)
  KK=0.0D0
  NO=DCMPLX(NN,KK)
13  FORMAT(F12.6)
   RETURN
   END
C -----
```

APENDICE E. CALCULO DEL OPERADOR MATRICIAL DE ROTACION EN LA REPRESENTACION DE PARIDAD Y LA MATRIZ T TRANSFORMADA.

Dados los ángulos que definen la rotación, "alpha", "beta" y "gamma", se procede, utilizando la ecuación (9.30) a evaluar el operador de rotación  $D(\alpha, \beta, \gamma)$  para luego, mediante la ecuación (9.36) obtener la matriz T del dispersor girado. A continuación el programa.

```

PROGRAM ROMATT
C -----C
c Las matrices T, cuyos nombres se especifican en T1 c
c son giradas segun los angulos de Euler leidos des- c
c de el archivo ROTACION.PRT c
c -----c
COMMON /YUI/C(70,140),MULTI(70,70)
COMMON /UIO/ B(70,70)
COMMON AS,ASH,NMAX
COMPLEX*16 B,C,P,NO,MULTI
REAL*8 TU,TA,AA,BB,EO,ALPHA,BETTA,GAMMA
INTEGER*4 I,J,AS,ASH,CI,CJ,K,NMAX,MET,NF,CICLO,FND
CHARACTER*12 IDENT,FLS,FLT,FLR
FLS='SDS'
C -----
OPEN(5,FILE='ROTACION.PRT',STATUS='OLD')
READ(5,25) ALPHA
READ(5,25) BETTA
READ(5,25) GAMMA
CLOSE(5)
c -----c
c FL1 almacena la matriz ADA INVERSA, FL2 almacena la c
c matriz T a rotar y FL# almacenara la matriz T gira c
c da c
c -----c
OPEN(6,FILE='T1',STATUS='OLD')
OPEN(8,FILE='TR',STATUS='OLD')
READ(6,39) NF,NMAX,FND,AA,BB
READ(8,39) NF,NMAX,FND,AA,BB
AS=2*NMAX*(2+NMAX)
DO 888 CICLO=1,NF
WRITE(*,*) CICLO
READ(6,37) FLT,EO
READ(8,37) FLR,EO
IF(CICLO.EQ.1) THEN
CALL ADAINV(ALPHA,BETTA,GAMMA,FLS)
ENDIF

```

```

C -----
OPEN(4, FILE=FLT, STATUS='OLD')
READ(4, 35) AS
ASH=2*AS
DO 1 I=1, AS
  DO 1 J=1, AS
    B(I, J)=(0.000, 0.000)
    C(I, J)=(0.000, 0.000)
    C(I, J+AS)=(0.000, 0.000)
1 CONTINUE
C -----
C SE LEE LA MATRIZ DE ROTACION TRANSFORMADA
C -----
OPEN(3, FILE=FLS, STATUS='OLD')
DO 4 I=1, AS
  DO 4 J=1, AS
    READ(3, 2) CI, CJ, P
    IF(CI.NE.(AS+1)) THEN
      C(CI, CJ)=P
    ELSE
      GOTO 43
  END IF
4 CONTINUE
43 CLOSE(3)
C -----
CALL MATINV
C -----
C SE LEE LA MATRIZ T EN EL LADO IZQUIERDO DE C
C -----
DO 10 I=1, AS
  DO 10 J=1, AS
    C(I, J)=(0.000, 0.000)
10 CONTINUE
C -----
C LECTURA DE LA MATRIZ T
C -----
DO 12 I=1, AS
  DO 12 J=1, AS
    READ(4, 2) CI, CJ, P
    IF(CI.NE.(AS+1)) THEN
      C(CI, CJ)=P
    ELSE
      GOTO 64
  END IF
12 CONTINUE
64 READ(4, 55) IDENT
   READ(4, 25) AA
   READ(4, 25) BB
   READ(4, 35) NMAX
   READ(4, 35) MET
   READ(4, 25) EO
   READ(4, 45) NO
   CLOSE(4)
   IDENT=' ESF. GIRADO'

```

```

C -----
C SE MULTIPLICA LA MATRIZ INVERSA DE D CON T
C -----
DO 14 I=1,AS
  DO 14 J=1,AS
    B(I,J)=(0.000,0.000)
    DO 14 K=1,AS
      B(I,J)=B(I,J)+C(K,J+AS)*C(I,K)
14 CONTINUE
C -----
C SE LEE LA MATRIZ D
C -----
OPEN(3,FILE=FLS,STATUS='OLD')
DO 83 I=1,AS
  DO 83 J=1,AS
    C(I,J)=(0.000,0.000)
83 CONTINUE
DO 17 I=1,AS
  DO 17 J=1,AS
    READ(3,2) CI,CJ,P
    IF(CI.NE.(AS+1)) THEN
      C(CI,CJ)=P
    ELSE
      GOTO 96
    END IF
17 CONTINUE
96 CLOSE(3)
C -----
C SE MULTIPLICA DINV*T POR D Y SE GUARDA EN EL LADO DERECHO D
C -----
DO 19 I=1,AS
  DO 19 J=1,AS
    C(I,J+AS)=(0.000,0.000)
    DO 19 K=1,AS
      C(I,J+AS)=C(I,J+AS)+B(K,J)*C(I,K)
19 CONTINUE
C -----
C SE ESCRIBE TODO
C -----
OPEN(7,FILE=FLR,STATUS='NEW')
WRITE(7,35) AS
DO 22 I=1,AS
  DO 22 J=1,AS
    IF(CDABS(C(I,J+AS)).NE.0.000) THEN
      WRITE(7,2) I,J,C(I,J+AS)
      GOTO 22
    END IF
22 CONTINUE
WRITE(7,2) AS+1,AS+1,2.2E-19,2.2E-19
WRITE(7,55) IDENT
WRITE(7,25) AA
WRITE(7,25) BB
WRITE(7,35) NMAX
WRITE(7,35) MPT

```

```

        WRITE(7,25) EO
        WRITE(7,45) NO
        CLOSE(7)
888  CONTINUE
        CLOSE(6)
        CLOSE(8)
C -----
  2  FORMAT(I3,1X,I3,1X,E26.20,1X,E26.20)
 25  FORMAT(F12.6)
 35  FORMAT(I12)
 37  FORMAT(5X,A12,2X,F10.4)
 39  FORMAT(5X,3(I10,2X),2(F10.4,2X))
 45  FORMAT(F12.6,F12.6)
 55  FORMAT(/A12)
C -----
500  END
C -----
      SUBROUTINE MATINV
      COMMON /YUI/C(70,140),MULTI(70,70)
      COMMON AS,ASH,NMAX
      INTEGER*4 AS,ASH,I,J,K
      COMPLEX*16 C,P,MULTI
73  DO 1 I=1,AS
      C(I,I+AS)=(1.0d0,0.0d0)
  1  CONTINUE
      CALL DIVI
      DO 2 K=1,AS-1
      IF(CDABS(C(K,K)).EQ.0.0d0) CALL SUST(K)
      DO 3 I=K+1,AS
      DO 3 J=ASH,K,-1
      C(I,J)=C(K,K)*C(I,J)-C(K,J)*C(I,K)
  3  CONTINUE
      CALL DIVI
  2  CONTINUE
      DO 5 I=2,AS
      DO 5 J=1,I-1
      C(I,J)=(0.0d0,0.0d0)
  5  CONTINUE
      DO 8 I=1,AS
      DO 8 J=ASH,I,-1
      C(I,J)=C(I,J)/C(I,I)
  8  CONTINUE
      DO 10 K=1,AS-1
      DO 10 I=1,AS-K
      DO 10 J=ASH,I,-1
      C(I,J)=C(I,J)*C(I+K,I+K)-C(I+K,J)*C(I,I+K)
10  CONTINUE
      RETURN
      END
C -----
      SUBROUTINE DIVI
      COMMON /YUI/C(70,140),MULTI(70,70)
      COMMON AS,ASH,NMAX
      COMPLEX*16 C,MULTI

```

```

REAL*8 BR,BI,B1,B2,B
INTEGER*4 AS,ASH,I,J
DO 890 I=1,AS
  B1=DABS(DREAL(C(I,1)))
  B2=DABS(DIMAG(C(I,1)))
  DO 2 J=2,ASH
    BR=DABS(DREAL(C(I,J)))
    BI=DABS(DIMAG(C(I,J)))
    IF(BR.GT.B1) B1=BR
    IF(BI.GT.B2) B2=BI
  2 CONTINUE
  IF(B1.GT.B2) THEN
    B=B1
  ELSE
    B=B2
  END IF
  IF(B.EQ.1.0DO) GOTO 890
  IF(B.EQ.0.0DO) THEN
    WRITE(*,*) 'CERO EN DIVI',I,B
    STOP
  END IF
  DO 3 J=1,ASH
    C(I,J)=C(I,J)/B
  3 CONTINUE
890 CONTINUE
RETURN
END

```

C

```

-----
SUBROUTINE SUST(K)
COMMON /YUI/C(70,140),MULTI(70,70)
COMMON AS,ASH,NMAX
COMPLEX*16 C,P,MULTI
INTEGER*4 AS,ASH,I,J,NMAX,K
DO 10 I=1,AS
  IF(CDABS(C(K+I,K)).NE.0.0DO) THEN
    DO 11 J=1,ASH
      P=C(K,J)
      C(K,J)=C(K+I,J)
      C(K+I,J)=P
    11 CONTINUE
    GOTO 20
  ELSE
    GOTO 10
  END IF
10 CONTINUE
20 RETURN
END

```

C

```

-----
SUBROUTINE ADAINV(ALPHA,BETTA,GAMMA,FL)
COMMON /YUI/C(70,140),MULTI(70,70)
COMMON AS,ASH,NMAX
COMPLEX*16 AFN,C,DWM,MULTI,P
INTEGER*4 AS,N,NMAX,M,SIG,CJ,CI,U,W,I,J,ASH,K
REAL*8 ALPHA,BETTA,GAMMA,PI

```

```

CHARACTER*12 FL
PI=3141592653589793.2385D-15
AS=AS/2
ASH=AS*2
ALPHA=ALPHA*PI/180.000
BETTA=BETTA*PI/180.000
GAMMA=GAMMA*PI/180.000
-----
C SE PROCEDE A HACER LA MATRIZ D CON ELEMENTOS DM`M
C AL LADO DERECHO DE C(I,J)
C -----
DO 193 I=1,AS
  DO 193 J=1,AS
    MULTI(I,J)=(0.000,0.000)
    C(I,J)=(0.000,0.000)
    C(I,J+AS)=(0.000,0.000)
193 CONTINUE
C -----
CALL MATA
C -----
CALL MATINV
C -----
DO 194 I=1,AS
  DO 194 J=1,AS
    C(I,J)=(0.000,0.000)
194 CONTINUE
DO 199 N=1,NMAX
  CI=N**2-1
  DO 199 W=-N,N,1
    CJ=N**2-1
    CI=CI+1
    DO 199 M=-N,N,1
      CJ=CJ+1
      C(CI,CJ)=DWM(W,M,N,ALPHA,BETTA,GAMMA)
199 CONTINUE
C -----
C SE HACE EL PRODUCTO A*D
C -----
DO 203 I=1,AS
  DO 203 J=1,AS
    MULTI(I,J)=(0.000,0.000)
    DO 203 K=1,AS
      MULTI(I,J)=MULTI(I,J)+C(I,K)*C(K,J+AS)
203 CONTINUE
DO 204 I=1,AS
  DO 204 J=1,AS
    C(I,J)=(0.000,0.000)
    C(I,J+AS)=(0.000,0.000)
204 CONTINUE
C -----
CALL MATA
C -----
DO 205 I=1,AS
  DO 205 J=1,AS

```

```

          C(I,J+AS)=(0.0DO,0.0DO)
          DO 205 K=1,AS
            C(I,J+AS)=C(I,J+AS)+C(I,K)*MULTI(K,J)
205 CONTINUE
C -----
C SE INICIALIZA EL LADO IZQUIERDO DE A*D
C -----
          AS=AS*2
          DO 206 I=1,AS
            DO 206 J=1,AS
              MULTI(I,J)=(0.0DO,0.0DO)
206 CONTINUE
C -----
C SE DUPLICA LA DIMENSIONALIDAD DE LA MATRIZ DE ROTACION
C TRANSFORMADA PARA QUE TENGA EL INDICE TAU
C -----
          DO 208 I=1,AS/2
            DO 208 J=1,AS
              IF(MOD((2*I-1+J),2).EQ.0) MULTI(2*I-1,J)=C(I,(J+AS+1)/2)
              IF(MOD((2*I+J),2).EQ.0) MULTI(2*I,J)=C(I,(J+AS)/2)
208 CONTINUE
C -----
C SE ESCRIBE TODO
C -----
          OPEN(7,FILE=FL,STATUS='OLD')
876 DO 306 I=1,AS
          DO 306 J=1,AS
            IF(CDABS(MULTI(I,J)).NE.0.0DO) WRITE(7,2) I,J,MULTI(I,J)
306 CONTINUE
          WRITE(7,2) AS+1,AS+1,2.2E-19,2.2E-19
          CLOSE(7)
          2 FORMAT(I3,1X,I3,1X,E26.20,1X,E26.20)
          END
C -----
          COMPLEX FUNCTION AFN*16(SIG,M,N,W,U)
          INTEGER*4 SIG,M,N,W,U,P
          IF (SIG.EQ.-1) GOTO 10
          IF (W.EQ.0) THEN
            AFN=(0.0DO,0.0DO)
          ELSE IF(W.GT.0) THEN
            IF ((W.EQ.M).AND.(U.EQ.N)) THEN
              AFN=(0.0DO,-0.5DO)
            ELSE
              AFN=(0.0DO,0.0DO)
            END IF
          ELSE IF(W.LT.0) THEN
            IF ((ABS(W).EQ.M).AND.(U.EQ.N)) THEN
              P=1
              IF(MOD(M,2).NE.0) P=-1
              AFN=P*(0.0DO,0.5DO)
            ELSE
              AFN=(0.0DO,0.0DO)
            END IF
          END IF
          END IF

```

```

RETURN
10 IF (M.EQ.0) GOTO 20
   IF (W.EQ.0) THEN
     AFN=(0.0DO,0.0DO)
   ELSE IF (W.GT.0) THEN
     IF ((W.EQ.M).AND.(U.EQ.N)) THEN
       AFN=(0.5DO,0.0DO)
     ELSE
       AFN=(0.0DO,0.0DO)
     END IF
   ELSE IF (W.LT.0) THEN
     IF ((ABS(W).EQ.M).AND.(U.EQ.N)) THEN
       P=1
       IF (MOD(M,2).NE.0) P=-1
       AFN=P*(0.5DO,0.0DO)
     ELSE
       AFN=(0.0DO,0.0DO)
     END IF
   END IF
RETURN
20 IF (W.NE.0) THEN
   AFN=(0.0DO,0.0DO)
 ELSE IF(N.EQ.U) THEN
   AFN=(1.0DO,0.0DO)
 ELSE IF(N.NE.U) THEN
   AFN=(0.0DO,0.0DO)
 END IF
RETURN
END

```

C

```

-----
COMPLEX FUNCTION DWM*16(W,M,N,ALPHA,BETTA,GAMMA)
INTEGER*4 W,M,N,S,SMIN,SMAX,P,RB,RA
REAL*8 ALPHA,BETTA,GAMMA,DUMMY1,DUMMY2,DUMMY3,DUMMY4
REAL*8 D1,D2,D3,D4,FACT,PERF
DUMMY1=0.0DO
SMIN=MAX(0,-(W+M))
SMAX=MIN((N-W),(N-M))
DO 24 S=SMIN,SMAX
  D1=FACT(N+M)/(FACT(N-W-S)*FACT(M+W+S))
  D2=FACT(N-M)/(FACT(S)*FACT(N-M-S))
  P=1
  IF(MOD(N-W-S,2).NE.0) P=-1
  RB=2*S+W+M
  D3=DCOS(BETTA/2.0DO)**(RB)
  RA=2*N-2*S-W-M
  D4=DSIN(BETTA/2.0DO)**(RA)
  DUMMY1=DUMMY1+D1*D2*P*D3*D4
24 CONTINUE
DUMMY2=FACT(N+W)*FACT(N-W)/(FACT(N+M)*FACT(N-M))
DUMMY2=DSQRT(DUMMY2)*DUMMY1
DUMMY3=DUMMY2*DCOS(W*ALPHA+M*GAMMA)
DUMMY4=DUMMY2*DSIN(W*ALPHA+M*GAMMA)
DWM=DCMPLX(DUMMY3,DUMMY4)
RETURN

```

```
END
C -----
REAL FUNCTION FACT*8(N)
INTEGER*4 N,I
FACT=1.0D0
DO 10 I=2,N
    FACT=FACT*I
10 CONTINUE
RETURN
END
C -----
SUBROUTINE MATA
COMMON /YUI/C(70,140),MULTI(70,70)
COMMON AS,ASH,NMAX
COMPLEX*16 AFN,C,MULTI
INTEGER*4 AS,ASH,NMAX,CI,CJ,N,M,SIG,U,W
CI=0
DO 150 N=1,NMAX
    DO 150 M=0,N
        DO 150 SIG=-1,1,2
            CJ=0
            IF((M.EQ.0).AND.(SIG.EQ.1)) GOTO 8
            CI=CI+1
8 DO 150 U=1,NMAX
                DO 150 W=-U,U,1
                    IF((M.EQ.0).AND.(SIG.EQ.1)) GOTO 150
                    CJ=CJ+1
                    C(CI,CJ)=AFN(SIG,M,N,W,U)
150 CONTINUE
RETURN
END
C -----
```

APENDICE F. CALCULO DE LA MATRIZ DE TRANSICION EFECTIVA DE UN SISTEMA DE DOS DISPERSORES TRASLADADOS EN FORMA SIMETRICA RESPECTO AL ORIGEN DEL SISTEMA DE REFERENCIA.

Utilizando la ecuación (6.8) se evalúa la matriz de transición del sistema calculando primero el término superior el cual se almacena en el archivo "CT.DAT" para luego obtener el término inferior y grabarlo en "CN.DAT". La matriz T del sistema se obtiene como la suma del contenido de ambos archivos y se almacena con el nombre especificado en "TC", un archivo de gestión. Los parámetros que definen la traslación de cada dispersor, especificados en el archivo "CLUSTER.PRT", son las coordenadas esféricas "psi", "heta" y "d". A continuación el programa.

```

PROGRAM CLUSTER
c -----c
c Programa para calcular la matriz T de un cluster for- c
c mado por dos esferoides UNIVERSIDAD DE COSTA RICA/ c
c -----c
COMMON /YUI/T,SGM,AS,A,B,NMAX,MET,EO,NO
common /fgh/qinv
complex*16 T(70,70),SGM(70,70),QINV(70,140);TU,TA,NO
real*8 a,b,psi,heta,kd,d,ko,eo
integer*4 met,nmax,ci,cj,i,j,n,m,k,as,CICLO,NF,FND
character*12 ident,FL1,FL2,FL3
MET=1
PI=3141592653589793.2385D-15
c -----c
open(3,file='CLUSTER.PRT',status='old')
read(3,66) PSI
read(3,66) HETA
read(3,66) D
close(3)
OPEN(51,FILE='T1',STATUS='OLD')
OPEN(52,FILE='T2',STATUS='OLD')
OPEN(53,FILE='TC',STATUS='OLD')
READ(51,49) NF,NMAX,FND,A,B
READ(52,49) NF,NMAX,FND,A,B
READ(53,49) NF,NMAX,FND,A,B
psi=psi*pi/180.0d0
heta=heta*pi/180.0d0
DO 888 CICLO=1,NF

```

```

WRITE(*,*) CICLO
READ(51,37) FL1,EO
READ(52,37) FL2,EO
READ(53,37) FL3,EO
c
c -----
c Se inicia calculo de componente CT
c -----
CALL LEE(FL2)
KO=2.0d0*PI*EO/1240.112284d0
KD=KO*D
do 11 i=1,as
  do 11 j=1,as
    sgm(i,j)=(0.0d0,0.0d0)
    qinv(i,j)=(0.0d0,0.0d0)
    qinv(i,j+as)=(0.0d0,0.0d0)
11  continue
    ident='      CLUSTER'
c -----
CALL TRSLN(psi,heta,2.0*kd)
c -----
OPEN(19,FILE='CN.DAT',STATUS='OLD')
DO 199 I=1,AS
  DO 199 J=1,AS
199 IF(SGM(I,J).NE.(0.0D0,0.0D0)) write(19,2) i,j,sgm(i,j)
  CONTINUE
  write(19,2) as+1,as+1,2.2e-19,2.2e-19
  CLOSE(19)
c -----
do 15 i=1,as
  do 15 j=1,as
    ta=(0.0d0,0.0d0)
    do 17 k=1,as
c -----
c SGM(-A1+A2) * T(2)
c -----
    ta=ta+sgm(i,k)*t(k,j)
17  continue
    qinv(i,j)=ta
15  continue
  do 18 i=1,as
    do 18 j=1,as
      ta=(0.0d0,0.0d0)
      do 20 k=1,as
c -----
c SGM(-A1+A2) T(2) SGM(-A2+A1)
c -----
      ta=ta+qinv(i,k)*sgm(j,k)
20  continue
      qinv(i,j+as)=ta
18  continue
  IF(FL1.NE.FL2) CALL LEE(FL1)
  do 21 i=1,as
    do 21 j=1,as
      ta=(0.0d0,0.0d0)

```

```

do 23 k=1,as
C -----
C SGM(-A1+A2) T(2) SGM(-A2+A1) T(1)
C -----
ta=ta+qinv(i,k+as)*t(k,j)
23 continue
qinv(i,j)=-ta
21 continue
do 24 i=1,as
C -----
C 1 + SGM(-A1+A2) T(2) SGM(-A2+A1) T(1)
C -----
qinv(i,i)=(1.0d0,0.0d0)+qinv(i,i)
24 continue
c -----
c CALL MATINV
c -----
do 26 i=1,as
do 26 j=1,as
qinv(i,j)=qinv(i,j+as)
26 continue
do 25 i=1,as
do 25 j=1,as
ta=(0.0d0,0.0d0)
do 27 k=1,as
C -----
C T(1) INV{ 1 - SGM(-A1+A2) T(2) SGM(-A2+A1) T(1) }
C -----
ta=ta+t(i,k)*qinv(k,j)
27 continue
qinv(i,j+as)=ta
25 continue
IF(FL1.NE.FL2) CALL LEE(FL2)
do 28 i=1,as
do 28 j=1,as
ta=(0.0d0,0.0d0)
do 30 k=1,as
C -----
C SGM(-A1+A2) T(2)
C -----
ta=ta+sgm(i,k)*t(k,j)
30 continue
qinv(i,j)=ta
28 continue
do 31 i=1,as
do 31 j=1,as
ta=(0.0d0,0.0d0)
do 33 k=1,as
C -----
C SGM(-A1+A2) T(2) R(A1-A2)
C -----
ta=ta+qinv(i,k)*dreal(sgm(j,k))
33 continue
t(i,j)=ta

```

```

31      continue
      do 34 i=1,as
        do 34 j=1,as
          if(i.eq.j) then
C          -----
C          1 + SGM(-A1+A2) T(2) R(A1-A2)
C          -----
          qinv(i,j)=(1.0d0,0.0d0)+t(i,j)
          else
          qinv(i,j)=t(i,j)
          endif
34      continue
      do 36 i=1,as
        do 36 j=1,as
          ta=(0.0d0,0.0d0)
          do 38 k=1,as
C          -----
C          M * N
C          -----
          ta=ta+qinv(i,k+as)*qinv(k,j)
38      continue
          t(i,j)=ta
36      continue
      CALL TRSLN(psi,heta,kd)
      OPEN(19,FILE='SG.DAT',STATUS='OLD')
      DO 299 I=1,AS
        DO 299 J=1,AS
299     IF(SGM(I,J).NE.(0.0D0,0.0D0)) WRITE(19,2) I,J,SGM(I,J)
        CONTINUE
        write(19,2) as+1,as+1,2.2e-19,2.2e-19
        CLOSE(19)
C          -----
      do 39 i=1,as
        do 39 j=1,as
          ta=(0.0d0,0.0d0)
          do 41 k=1,as
C          -----
C          M * N * R(-A1)
C          -----
          ta=ta+t(i,k)*dreal(sgm(k,j))
41      continue
          qinv(i,j)=ta
39      continue
      open(2,file='CT.DAT',status='OLD')
      do 42 i=1,as
        do 42 j=1,as
          tu=(0.0d0,0.0d0)
          do 44 k=1,as
C          -----
C          R(A1) * M * N * R(-A1)
C          -----
          tu=tu+dreal(sgm(k,i))*qinv(k,j)
44      continue
          if(cdabs(tu).ne.0.0d0) WRITE(2,2) I,J,TU

```

```

42      continue
      write(2,2) as+1,as+1,2.2e-19,2.2e-19
      close(2)
c      -----
C      Se inicia calculo de componente CN
c      -----
      CALL LEE(FL1)
      do 99 i=1,as
         do 99 j=1,as
            sgm(i,j)=(0.0d0,0.0d0)
            qinv(i,j)=(0.0d0,0.0d0)
            qinv(i,j+as)=(0.0d0,0.0d0)
99      continue
      OPEN(19,FILE='CN.DAT',STATUS='OLD')
105     READ(19,2) CI,CJ,TA
      IF(CI.GT.AS) GOTO 110
      sgm(ci,cj)=ta
      GOTO 105
110    CLOSE(19)
C      -----
      do 115 i=1,as
         do 115 j=1,as
            ta=(0.0d0,0.0d0)
            do 117 k=1,as
C              -----
C              SGM(-A2+A1) T(1)
C              -----
            ta=ta+sgm(k,i)*t(k,j)
117     continue
            qinv(i,j)=ta
115     continue
            do 118 i=1,as
               do 118 j=1,as
                  ta=(0.0d0,0.0d0)
                  do 120 k=1,as
C                      -----
C                      SGM(-A2+A1) T(1) SGM(-A1+A2)
C                      -----
            ta=ta+qinv(i,k)*sgm(k,j)
120     continue
            qinv(i,j+as)=ta
118     continue
            IF(FL1.NE.FL2) CALL LEE(FL2)
            do 121 i=1,as
               do 121 j=1,as
                  ta=(0.0d0,0.0d0)
                  do 123 k=1,as
C                      -----
C                      SGM(-A2+A1) T(1) SGM(-A1+A2) T(2)
C                      -----
            ta=ta+qinv(i,k+as)*t(k,j)
123     continue
            qinv(i,j)=-ta
121     continue

```

```

do 124 i=1,as
C
C      1 - SGM(-A2+A1) T(1) SGM(-A1+A2) T(2)
C      -----
      qinv(i,i)=(1.0d0,0.0d0)+qinv(i,i)
124  continue
c      -----
c      CALL MATINV
c      -----
do 126 i=1,as
      do 126 j=1,as
          qinv(i,j)=qinv(i,j+as)
126  continue
do 125 i=1,as
      do 125 j=1,as
          ta=(0.0d0,0.0d0)
          do 127 k=1,as
C
C      -----
C      T(2) INV{ 1 - SGM(-A2+A1) T(1) SGM(-A1+A2) T(2) }
C      -----
          ta=ta+t(i,k)*qinv(k,j)
127  continue
          qinv(i,j+as)=ta
125  continue
      IF(FL1.NE.FL2) CALL LEE(FL1)
do 128 i=1,as
      do 128 j=1,as
          ta=(0.0d0,0.0d0)
          do 130 k=1,as
C
C      -----
C      SGM(-A2+A1) T(1)
C      -----
          ta=ta+sgm(k,i)*t(k,j)
130  continue
          qinv(i,j)=ta
128  continue
do 131 i=1,as
      do 131 j=1,as
          ta=(0.0d0,0.0d0)
          do 133 k=1,as
C
C      -----
C      SGM(-A2+A1) T(1) R(A2-A1)
C      -----
          ta=ta+qinv(i,k)*dreal(sgm(k,j))
133  continue
          t(i,j)=ta
131  continue
do 134 i=1,as
      do 134 j=1,as
          if(i.eq.j) then
C
C      -----
C      1 + SGM(-A2+A1) T(1) R(A2-A1)
C      -----
          qinv(i,j)=(1.0d0,0.0d0)+t(i,j)

```

```

        else
          qinv(i,j)=t(i,j)
        endif
134  continue
      do 136 i=1,as
        do 136 j=1,as
          ta=(0.0d0,0.0d0)
          do 135 k=1,as
C           -----
C           M * N
C           -----
            ta=ta+qinv(i,k+as)*qinv(k,j)
135          continue
            t(i,j)=ta
136          continue
          OPEN(19,FILE='SG.DAT',STATUS='OLD')
137          READ(19,2) CI,CJ,TA
            IF(CI.GT.AS) GOTO 138
            sgm(ci,cj)=ta
            GOTO 137
138          CLOSE(19)
C           -----
            do 139 i=1,as
              do 139 j=1,as
                ta=(0.0d0,0.0d0)
                do 141 k=1,as
C                 -----
C                 M * N * R(-A2)
C                 -----
                  ta=ta+t(i,k)*dreal(sgm(j,k))
141                continue
                  qinv(i,j)=ta
139              continue
            open(2,file='CN.DAT',status='OLD')
            do 142 i=1,as
              do 142 j=1,as
                tu=(0.0d0,0.0d0)
                do 144 k=1,as
C                 -----
C                 R(A2) * M * N * R(-A2)
C                 -----
                  tu=tu+dreal(sgm(i,k))*qinv(k,j)
144                continue
                  if(cdabs(tu).ne.0.0d0) WRITE(2,2) I,J,TU
142              continue
            write(2,2) as+1,as+1,2.2e-19,2.2e-19
            close(2)
C           -----
C           Se suman ambas contribuciones para obtener T
C           -----
            open(3,file='CT.DAT',status='old')
            open(4,file='CN.DAT',status='old')
            open(5,file='FL3',status='NEW')
            write(5,77) as

```

```

156      read(3,2) ci,cj,tu
        read(4,2) ci,cj,ta
        if(ci.gt.as) goto 166
        tu=tu+ta
        if(cdabs(tu).NE.0.0DO) WRITE(5,2) CI,CJ,TU
        GOTO 156
166      write(5,2) as+1,as+1,2.2e-19,2.2e-19
        write(5,399) ident
        write(5,66) a
        write(5,66) b
        write(5,77) nmax
        write(5,77) met
        write(5,66) eo
        write(5,88) no
        close(3)
        close(4)
        close(5)
888      CONTINUE
        CLOSE(51)
        CLOSE(52)
        CLOSE(53)
c      -----
2      format(i3,1x,i3,1x,e26.20e2,1x,e26.20e2)
37     FORMAT(5X,A12,2X,F10.4)
49     FORMAT(5X,3(I10,2X),2(F10.4,2X))
66     format(f12.6)
77     format(i12)
88     format(f12.6,f12.6)
399    format(/a12)
end
c      -----
c      SUBROUTINE TRSLN(PHI,HETA,KA)
c      -----c
c      Se evalua el operador de traslacion utilizando las      c
c      expresiones incluidas en el apendice B                  c
c      -----c
COMMON /YUI/T,SGM,AS,A,B,NMAX,MET,EO,NO
complex*16 t(70,70),sgm(70,70),CMN,DMN,NO
integer*4 ci,cj,nmax,n,u,m,w,sig,del,tau,miu,as,MET
real*8 me,we,emu,psi,heta,ka,ANGLO1,ANGLO2,SGN
real*8 SGN1,A,B,EO
ci=0
do 150 N=1,NMAX
  do 150 M=0,N
    do 150 sig=-1,1,2
      do 150 tau=1,2

      cj=0
      if((m.eq.0).and.(sig.eq.1)) goto 8
      ci=ci+1
8      do 150 U=1,NMAX
        do 150 W=0,U
          do 150 del=-1,1,2
            do 150 miu=1,2
              if((m.eq.0).and.(sig.eq.1)) goto 150

```

```

if((w.eq.0).and.(del.eq.1)) goto 150
cj=cj+1
if(m.eq.0) then
  me=1.0d0
else
  me=2.0d0
endif
if(w.eq.0) then
  we=1.0d0
else
  we=2.0d0
endif
emu=dsqrt(me*we)
anglo1=(m-w)*psi
anglo2=(m+w)*psi
sgn=1.0d0
if(mod(m,2).ne.0) sgn=-1.0d0
if(tau.ne.miu) goto 133
if(sig.eq.del) then
  sgn1=1.0d0
  if(mod(w,2).ne.0) sgn1=-1.0d0
sgm(ci,cj)=sgn*emu*(sgn1*DCOS(ANGLO1)*cmn(n,u,m,w,heta,ka)-
+ sig*cmn(n,u,m,-w,heta,ka)*DCOS(ANGLO2))/2.0d0
else
  sgn1=1.0d0
  if(mod(w,2).ne.0) sgn1=-1.0d0
  sgn1=-del*sgn1
sgm(ci,cj)=sgn*emu*(sgn1*dsin(anglo1)*cmn(n,u,m,w,heta,ka)+
+ dsin(anglo2)*cmn(n,u,m,-w,heta,ka))/2.0d0
endif
goto 150
133 if(sig.eq.del) then
  sgn1=1.0d0
  if(mod(w,2).ne.0) sgn1=-1.0d0
sgm(ci,cj)=(0.0d0,1.0d0)*sgn*emu*(sgn1*dsin(anglo1)*
+ dmn(n,u,m,w,heta,ka)-sig*dsin(anglo2)*
+ dmn(n,u,m,-w,heta,ka))/2.0d0
else
  sgn1=1.0d0
  if(mod(w,2).ne.0) sgn1=-1.0d0
  sgn1=-sig*sgn1
sgm(ci,cj)=(0.0d0,1.0d0)*sgn*emu*(sgn1*
+ dmn(n,u,m,w,heta,ka)-dmn(n,u,m,-w,heta,ka))/2.0d0
endif
150 continue
return
end
c -----
c REAL*8 FUNCTION WIGNER(J1,J2,J3,M1,M2,M3)
c -----c
c Se evalua el simbolo 3-j de Wigner, utilizando la c
c forma optimizada de la ecuacion (B.8) c
c -----c
c integer*4 j1,j2,j3,m,m1,m2,m3,m4,z,d1,d2,d3,d4,d5

```

```

real*8 cg,sum,a0,a1,a2,a3,a4,a5,sgn,fact
m=m1+m2
m4=-m3
if(m4.ne.m) then
    cg=0.0d0
    goto 200
endif
sum=0.0d0
z=0
100 d4=j3-j2+m1+z
    if(d4.lt.0) goto 105
    d5=j3-j1-m2+z
    if(d5.lt.0) goto 105
    d1=j1+j2-j3-z
    if(d1.lt.0) goto 110
    d2=j1-m1-z
    if(d2.lt.0) goto 110
    d3=j2+m2-z
    if(d3.lt.0) goto 110
    a0=fact(z)
    a1=fact(d1)
    a2=fact(d2)
    a3=fact(d3)
    a4=fact(d4)
    a5=fact(d5)
    sgn=1.0d0
    if(mod(z,2).ne.0) sgn=-1.0d0
    sum=sum+sgn/(a0*a1*a2*a3*a4*a5)
105 z=z+1
    goto 100
110 a1=(2*j3+1)*fact(j1+j2-j3)*fact(j1-j2+j3)
    a1=a1*fact(j2-j1+j3)/fact(j1+j2+j3+1)
    a2=fact(j1+m1)*fact(j1-m1)*fact(j2+m2)*fact(j2-m2)
    a2=a2*fact(j3-m4)*fact(j3+m4)
    a1=dsqrt(a1*a2)
    cg=a1*sum
200 sgn=1.0d0
    z=j1-j2-m3
    if(mod(z,2).ne.0) sgn=-1.0d0
    a1=1.0d0/(2.0d0*j3+1.0d0)
    wigner=sgn*dsqrt(a1)*cg
    return
end

c -----
c COMPLEX*16 FUNCTION CMN(N,U,M,W,HETA,KA)
c -----c
c Se implementa la ecuacion (B.6) para establecer el c
c coeficiente C(mn,m'n') implicito en el operador de c
c traslacion c
c -----c
integer*4 n,u,m,w,l,z,s,p5
real*8 f1,f2,f3,f4,f5,f6,f7,h,ll,sgn,sgnn
real*8 x,sen,wigner,fi,heta,ka,p1,p2,BESSEL,EU,FACT,PN
complex*16 sum,hnkl

```

```

cmn=(0.0d0,0.0d0)
sum=(0.0d0,0.0d0)
f1=2.0d0*n+1.0d0
f2=2.0d0*u+1.0d0
f4=1.0d0*n*(n+1)
f5=1.0d0*u*(u+1)
x=dcos(heta)
sen=dsin(heta)
do 100 l=abs(n-u),n+u
  z=n+u+1
  if(mod(z,2).ne.0) then
    sum=(0.0d0,0.0d0)
    goto 105
  endif
  f3=fact(l-m+w)
  f6=fact(l+m-w)
  f7=1.0d0*l*(l+1)
  h=dsqrt(f1*f2*f3/(f4*f5*f6))
  ll=f4+f5-f7
  sgn=1.0d0
  z=(u-n+1)/2
  if(mod(z,2).ne.0) sgn=-1.0d0
  hnkl=dcmplx(bessel(l,ka),eu(l,ka))
  s=0
  p5=abs(m-w)
  IF((P5.EQ.0).AND.(SEN.EQ.0.ODO)) THEN
    SUM=SGN*(2.0d0*l+1.0d0)*H*WIGNER(N,U,L,S,S,S)*
+     WIGNER(N,U,L,M,-W,(W-M))*LL*HNKL*PN(L,X)
  ELSE
    sum=sgn*(2.0d0*l+1.0d0)*h*wigner(n,u,l,s,s,s)*
+     wigner(n,u,l,m,-w,(w-m))*ll*hnkl*sen*fi(l,p5,x,sen)
  END IF
  sgnn=-1.0d0
  if(mod(p5,2).eq.0) sgnn=1.0d0
  if(w.gt.m) then
    p1=fact(l-p5)
    p2=fact(l+p5)
    sum=sum*sgnn*p1/p2
  endif
105   cmn=cmn+sum
100   continue
      sgn=1.0d0
      if(mod(w,2).ne.0) sgn=-1.0d0
      cmn=sgn*cmn/2.0d0
      return
      end
c -----
c COMPLEX*16 FUNCTION DMN(N,U,M,W,HETA,KA)
c -----c
c Se implementa la ecuacion (B.7) para establecer el c
c coeficiente D(mn,m'n') implicito en el operador de c
c traslacion c
c -----c
c integer*4 n,u,m,w,l,z,s,p5

```

```

real*8 fact,f1,f2,f3,f4,f5,f6,f7,h,sgnn,PN
real*8 x,sen,wigner,fi,heta,ka,p1,p2,BESSEL,EU
complex*16 sum,hnkl,sgn
dmn=(0.0d0,0.0d0)
sum=(0.0d0,0.0d0)
f1=2.0d0*n+1.0d0
f2=2.0d0*u+1.0d0
f4=1.0d0*n*(n+1)
f5=1.0d0*u*(u+1)
x=dcos(heta)
sen=dsin(heta)
do 100 l=abs(n-u)+1,n+u
    z=n+u+l-1
    if(mod(z,2).ne.0) then
        sum=(0.0d0,0.0d0)
        goto 105
    endif
    f3=fact(l-m+w)
    f6=fact(l+m-w)
    f7=(l*1-(n-u)**2)*((n+u+1)**2-l*1)
    h=dsqrt(f1*f2*f3*f7/(f4*f5*f6))
    sgn=(0.0d0,1.0d0)**(u-n+1)
    hnkl=dcmplx(bessel(l,ka),eu(l,ka))
    s=0
    p5=abs(m-w)
    IF((P5.EQ.0).AND.(SEN.EQ.0.0d0)) THEN
        SUM=SGN*(2.0d0*1+1.0d0)*h*WIGNER(N,U,(L-1),S,S,S)*
+         WIGNER(N,U,L,M,-W,(W-M))*HNKL*PN(L,X)
    ELSE
        sum=sgn*(2.0d0*1+1.0d0)*h*wigner(n,u,(l-1),s,s,s)*
+         wigner(n,u,l,m,-w,(w-m))*hnkl*sen*fi(l,p5,x,sen)
    END IF
    sgnn=-1.0d0
    if(mod(p5,2).eq.0) sgnn=1.0d0
    if(w.gt.m) then
        p1=fact(l-p5)
        p2=fact(l+p5)
        sum=sum*sgnn*p1/p2
    endif
105    dmn=dmn+sum
100 continue
    sgnn=1.0d0
    if(mod(w,2).ne.0) sgnn=-1.0d0
    dmn=sgnn*dmn/2.0d0
    return
end

c -----
REAL*8 FUNCTION BESSEL(N,W)
integer*4 n,m
real*8 a1,a3,dfact,fact,w,perf,porf,marg,b
if(n.eq.0) then
    bessel=dsin(w)/w
else if(n.eq.1) then
    bessel=dsin(w)/w**2-dcos(w)/w

```

```

        else
        m=-1
        perf=0.0d0
        b=0.5d0*w*w
50      m=m+1
        marg=(-b)**m/(fact(m)*dfact(2*n+2*m+1))
        porf=perf
        perf=perf+marg
        a3=porf-perf
        a1=dabs(a3/perf)
        if(a1.le.1.0d-4) goto 100
        goto 50
100     bessel=w**n*perf
endif
200    return
end
c -----
REAL*8 FUNCTION EU(N,W)
integer*4 n,m
real*8 w,f(20)
f(1)=-dcos(w)/w
f(2)=-dcos(w)/w**2-dsin(w)/w
if(n.le.1) then
    eu=f(n+1)
else
    do 10 m=3,n+1
        f(m)=(2*m-3)*f(m-1)/w-f(m-2)
10     continue
    eu=f(n+1)
end if
return
end
c -----
SUBROUTINE MATINV
COMMON /YUI/T,SGM,AS,A,B,NMAX,MET,EO,NO
COMMON /FGH/QINV
complex*16 t(70,70),sgm(70,70),QINV(70,140),NO
integer*4 n,m,i,j,k,AS,ASH,NMAX,MET
REAL*8 EO,A,B
ash=2*as
do 20 i=1,as
    do 20 j=as+1,ash
        if(i.eq.(j-as)) then
            qinv(i,j)=(1.0d0,0.0d0)
        else
            qinv(i,j)=(0.0d0,0.0d0)
        endif
20    continue
do 24 k=1,as-1
    do 334 i=k,as
        if(cdabs(qinv(i,k)).ne.0.0d0) then
            do 333 j=ash,k,-1
                qinv(i,j)=qinv(i,j)/qinv(i,k)
333        continue

```

```

        end if
334    continue
        do 25 i=k+1,as
            if(cdabs(qinv(i,k)).ne.0.0d0) then
                do 26 j=ash,k,-1
                    qinv(i,j)=qinv(k,k)*qinv(i,j)-qinv(k,j)*qinv(i,k)
26                continue
                    end if
25            continue
24        continue
        do 27 i=2,as
            do 27 j=1,i-1
                qinv(i,j)=(0.0d0,0.0d0)
27            continue
        do 29 i=1,as
            do 29 j=ash,i,-1
                qinv(i,j)=qinv(i,j)/qinv(i,i)
29            continue
        do 31 k=1,as-1
            do 31 i=1,as-k
                if(cdabs(qinv(i,i+k)).ne.0.0d0) then
                    do 33 j=ash,i,-1
                        qinv(i,j)=qinv(i,j)-qinv(i+k,j)*qinv(i,i+k)
33                    continue
                        end if
31                continue
            return
        end

```

c

```

-----
REAL*8 FUNCTION FI(N,M,X,SEN)
integer*4 i,j,m,n
real*8 x,p(20,20),sen,dfact,lfi
if((m.ne.0).and.(m.le.n)) then
    goto 560
    else-if(m.gt.n) then
        fi=0.0d0
        goto 730
    else
        fi=lfi(n,x,sen)
        goto 730
    endif
560 if(m.eq.n) then
        fi=sen**(n-1)*dfact(2*n-1)
        goto 730
    endif
    if(m.eq.1) then
        p(2,m)=3.0d0*x
        if(n.eq.2) then
            fi=p(n,m)
            goto 730
        endif
    endif
    p(m-1,m)=0.0d0
    p(m,m)=sen**(m-1)*dfact(2*m-1)

```

```

do 55 i=m+1,n
  p(i,m)=((2*i-1)*x*p(i-1,m)-(i-1+m)*p(i-2,m))/(i-m)
55 continue
  fi=p(n,m)
730 return
end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION DFACT(N)
integer*4 n,j,i,k
dfact=1.0d0
if(n.eq.0) goto 810
if(mod(n,2).eq.0) goto 15
j=(n+1)/2
do 210 i=1,j
  k=2*i-1
  dfact=dfact*k
210 continue
goto 810
15 j=n/2
do 20 i=1,j
  k=2*i
  dfact=dfact*k
20 continue
810 return
end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION LFI(N,X,SEN)
integer*4 m,n
real*8 x,sen,f(20)
f(1)=1.0d0/sen
f(2)=x/sen
if(n.eq.0) then
  lfi=f(1)
else if(n.eq.1) then
  lfi=f(2)
else
  do 10 m=3,n+1
    f(m)=((2*m-3)*x*f(m-1)-(m-2)*f(m-2))/(m-1)
10 continue
  lfi=f(n+1)
endif
return
end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION FACT(N)
integer*4 n
fact=1.0d0
do 10 i=2,n
  fact=fact*i
10 continue
return
end

```

```

c -----
REAL*8 FUNCTION PN(N,X)

```

```

integer*4 m,n
real*8 f(20),X
f(1)=1.0d0
f(2)=X
if(n.eq.0) then
  PN=f(1)
else if(n.eq.1) then
  PN=f(2)
else
  do 10 m=3,n+1
    f(m)=((2*m-3)*X*f(m-1)-(m-2)*f(m-2))/(m-1)
10  continue
    PN=F(n+1)
endif
return
end

```

```

c -----
SUBROUTINE LEE(FL)
COMMON /YUI/T,SGM,AS,A,B,NMAX,MET,EO,NO
INTEGER*4 AS,NMAX,MET,I1,J1,ci,cj
REAL*8 A,B,EO
COMPLEX*16 T(70,70),SGM(70,70),NO,TU
CHARACTER*8 FL
OPEN(1,FILE=FL,STATUS='OLD')
READ(1,77) AS
DO 5 I1=1,AS
  DO 5 J1=1,AS
    T(I1,J1)=(0.0D0,0.0D0)
5  CONTINUE
13  READ(1,2) CI,CJ,TU
    IF(CI.GT.AS) GOTO 43
    T(CI,CJ)=TU
    GOTO 13
43  READ(1,399) IDENT
    READ(1,66) A
    READ(1,66) B
    READ(1,77) NMAX
    READ(1,77) MET
    READ(1,66) EO
    READ(1,88) NO
    CLOSE(1)
2  FORMAT(I3,1X,I3,1X,E26.20E2,1X,E26.20E2)
66  FORMAT(F12.6)
77  FORMAT(I12)
88  FORMAT(F12.6,F12.6)
399  FORMAT(/A12)
999  RETURN
END
c -----

```