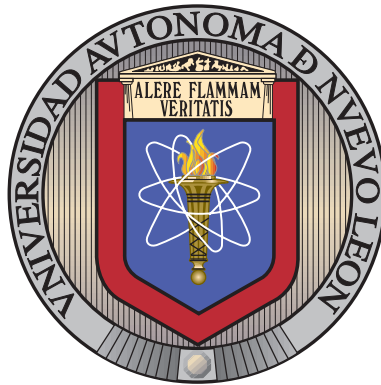


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

SUBDIRECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO



ESTUDIO DE SENSORES CON FIBRAS ÓPTICAS
ESPECIALES

POR

MCIE MARIO ANGEL RICO MENDEZ

COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTORADO EN INGENIERÍA FÍSICA

DICIEMBRE 2025

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

SUBDIRECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO



ESTUDIO DE SENSORES CON FIBRAS ÓPTICAS
ESPECIALES

POR

MCIE MARIO ANGEL RICO MENDEZ

COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTORADO EN INGENIERÍA FÍSICA

DICIEMBRE 2025


Universidad Autónoma de Nuevo León

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Subdirección de Estudios de Posgrado

Los miembros del Comité de Tesis recomendamos que la Tesis «Estudio de sensores con fibras ópticas especiales», realizada por el alumno MCIE Mario Angel Rico Mendez, con número de matrícula 1501056, sea aceptada para su defensa como requisito parcial para obtener el grado de Doctorado en Ingeniería Física .

El Comité de Tesis



Dr. Romeo de Jesús Selvas Aguilar

Asesor




Dr. Daniel Toral Acosta

Revisor



Dra. Oxana Vasilievna Kharissova

Revisor



Dr. Manuel García Méndez

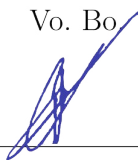
Revisor



Dr. Roberto Robledo Fava

Revisor

Vo. Bo



Dr. Alvaro Eduardo Cordero Franco

Subdirección de Estudios de Posgrado

San Nicolás de los Garza, Nuevo León, diciembre 2025

A mi familia.

Su apoyo constante y su comprensión a lo largo de este camino académico. Su confianza, paciencia y aliento fueron fundamentales para superar los desafíos que implicó la realización de este trabajo.

A Angélica.

Gracias por el apoyo y la tolerancia en los momentos más difíciles.

Agradecimientos

Expreso mi más sincero agradecimiento al Comité de Tesis, por su valiosa orientación académica, su disposición constante y sus pertinentes observaciones, las cuales contribuyeron de manera significativa al rigor y calidad de este trabajo.

Expreso un especial agradecimiento a mi asesor, por su acompañamiento académico, su compromiso, paciencia y confianza a lo largo de todo el proceso de investigación, así como por sus enseñanzas y guía profesional, fundamentales para la culminación de este proyecto doctoral.

Asimismo, agradezco a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por el apoyo brindado para la realización de mis estudios de doctorado, el cual hizo posible el desarrollo y conclusión de esta investigación.

Mario Angel Rico Mendez

Diciembre 2025

RESUMEN

Publicación No. _____

Mario Angel Rico Mendez, Dr. Ingeniería Física
 Universidad Autónoma de Nuevo León, 2025

Profesor asesor: Dr. Romeo de Jesús Selvas Aguilar

Esta tesis presenta el diseño, modelado y validación experimental de un sensor interferométrico Mach–Zehnder (MZI) basado en fibra óptica *tapered* para el monitoreo del pH en solución y el seguimiento de la adsorción del colorante Alizarin Red S (ARS). La estructura consiste en dos transiciones cónicas (DT/UT) que actúan como divisor y recombinador modal, separadas por una longitud efectiva $L \approx 10$ mm, con cintura del orden de $40 \mu\text{m}$. La interrogación espectral (1520–1600 nm) produce una firma con tres muescas profundas (relación de extinción ~ 16.7 dB) y *rango espectral libre (FSR)* suficiente para el rastreo robusto de λ_m . En condiciones ambientales controladas se observaron derivas subnanométricas en ventanas de 50 min y un coeficiente térmico efectivo del orden de 4×10^{-2} nm/°C, compatibles con operación *in situ* con estabilización moderada.

El modelado numérico se realizó mediante FDTD 2D, extrayendo $n_{\text{eff}}(\lambda)$ de las contribuciones dominantes (modo cuasi-núcleo y modo de cubierta) y reconstruyendo la transmisión a partir de la fase $\Delta\phi(\lambda) = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta n_{\text{eff}} L$. El esquema reproduce la posición y separación de muescas con discrepancias de centésimas de nanómetro tras un ajuste fino de índices dentro de tolerancias del fabricante, y permite estudiar la sensibilidad al variar L y el diámetro de cintura.

Experimentalmente, el sensor mostró sensibilidad espectral a pH (4, 7 y 10) con alta linealidad local alrededor de la muesca ~ 1559 nm. La funcionalización con nanotubos de carbono (MWCNT; variantes COOH, OH y Fe) se integró sin degradar la visibilidad interferométrica.

Índice general

1. Introducción y planteamiento del problema	1
1.1. Motivación	1
1.2. Interferómetro de fibra óptica y ventajas de la geometría	2
1.3. Propuesta y evidencia preliminar	2
1.4. Problema de investigación	2
1.5. Estado del arte	3
1.6. Planteamiento del problema	4
1.7. Preguntas de investigación	4
1.8. Hipótesis	5
1.9. Objetivo general	5
1.10. Objetivos específicos	5
1.11. Aportes esperados	6
1.12. Alcance y delimitaciones	6
1.13. Estructura de la tesis	6
2. Fundamentos teóricos	8
2.1. Fundamentos esenciales de la fibra óptica	8
2.2. Transmisión de la luz a través de la fibra óptica.	9
2.3. Interferómetro Mach-Zehnder (MZI)	12
2.3.1. MZI de espacio libre	12
2.3.2. MZI en una fibra óptica	14

2.3.3. Sensores de fibra óptica	15
2.4. Onda evanescente y fibras adelgazadas	16
2.5. Sensibilidad a índice de refracción y pH	17
2.6. Sensibilidades cruzadas: temperatura y deformación	17
2.7. Métricas espectrales y de desempeño	18
2.8. Modelado numérico transversal y extracción de n_{eff}	19
2.9. Nanotubos de carbono (MWCNTs)	20
2.9.1. Funcionalización y acoplamiento físico-óptico	21
2.10. Colorante Alizarin Red S (ARS)	21
2.11. Modelos de adsorción	22
2.12. Síntesis y lineamientos para el diseño	23
2.13. Resumen	24
3. Modelado numérico (FDTD)	26
3.1. Objetivo	26
3.2. Método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD)	26
3.3. Ecuaciones de Maxwell y actualización Yee	29
3.3.1. Condición de estabilidad de Courant	29
3.4. Dominio computacional, malla y fronteras	30
3.4.1. Dominio 2D y subdominios	30
3.4.2. Resolución espacial	30
3.4.3. Condiciones de frontera: PML	30
3.5. Dominio computacional, malla y fronteras (2D-FDTD)	31
3.5.1. Justificación del modelo 2D	31
3.6. Ecuaciones de Maxwell discretizadas y malla de Yee (2D-FDTD)	32
3.6.1. Recordatorio continuo	32
3.6.2. Malla de Yee y esquema <i>leap-frog</i>	32
3.6.3. Discretización 2D para modo TM_z (usado con frecuencia en sección trans- versal)	33

3.6.4.	Discretización 2D para modo TE_z	34
3.6.5.	Condición de estabilidad (Courant) en 2D	35
3.6.6.	Observaciones prácticas (malla de Yee)	35
3.6.7.	Dominio 2D y condiciones de frontera	35
3.6.8.	Malla y estabilidad	36
3.6.9.	Polarización y extracción modal	36
3.7.	Geometría y materiales	36
3.8.	Fuente modal y monitores	37
3.9.	Reconstrucción interferométrica (modelo híbrido)	38
3.10.	Plan de simulación	38
3.11.	Métricas extraídas	40
3.12.	Validación con el experimento	41
3.13.	Análisis de sensibilidad	42
3.13.1.	Separación efectiva L	42
3.13.2.	Cintura (WT)	43
3.13.3.	Índice externo n_{ext}	43
3.14.	Limitaciones del modelo	43
3.15.	Pseudocódigo del flujo FDTD	44
3.16.	Resumen	44
4.	Metodología	46
4.1.	Diseño del sensor	46
4.2.	Fabricación del sensor	46
4.2.1.	Fabricación del interferómetro de Mach–Zehnder en fibra <i>tapered</i>	47
4.3.	Funcionalización de la fibra con MWCNT	48
4.4.	Preparación de soluciones	49
4.5.	Configuración experimental	50
4.6.	Simulación computacional (FDTD)	50
4.7.	Parámetros de análisis	51

4.8. Resumen	52
5. Resultados Experimentales	54
5.1. Resultados experimentales I	54
5.1.1. Objetivo	54
5.1.2. Configuración experimental	54
5.1.3. Modelo de operación	55
5.1.4. Respuesta espectral de referencia (sin medio externo)	55
5.1.5. Detección de pH (pH 4, 7 y 10)	56
5.1.6. Estabilidad a corto plazo	57
5.1.7. Fluctuación de potencia óptica	57
5.1.8. Desplazamiento en la longitud de onda	58
5.2. Resultados experimentales II	60
5.2.1. Objetivo y alcance	60
5.2.2. Materiales adsorbentes y protocolos de funcionalización	61
5.2.3. Soluciones de ARS y condiciones	61
5.2.4. Modelado cinético	62
5.2.5. Isotermas de equilibrio	63
5.2.6. Efecto del pH en la adsorción y en la respuesta óptica	64
5.2.7. Eficiencia de remoción y balance de masa	65
5.2.8. Reusabilidad y regeneración	65
5.3. Discusión	65
6. Discusión	67
6.1. Visión integrada del diseño óptico y su respuesta	67
6.2. Concordancia modelo–experimento	67
6.3. Desempeño de la sensibilidad	68
6.4. Efecto de la funcionalización y acoplamiento fisicoquímico–óptico	68
6.5. Robustez térmica, repetibilidad y fuentes de incertidumbre	69
6.6. Comparación con el estado del arte	69

6.7. Implicaciones prácticas y escalabilidad	70
7. Conclusiones y trabajo futuro	71
7.1. Conclusiones generales	71
7.2. Aportaciones principales	72
7.3. Limitaciones sintetizadas	72
7.4. Trabajo futuro	73
A. Derivación de las ecuaciones discretizadas para TM_z	74
B. Implementación FDTD (TM_z): código	78
B.1. Propósito y alcance	78
B.2. Estructura y correspondencia ecuaciones–código	78
B.3. Notas de estabilidad, BCs y reproducibilidad	79
B.4. Listado del código (fragmento TM_z con PML y fuente por línea)	79
B.5. Consideraciones	84
C. Modelos cinéticos PFO y PSO	85
C.1. Definiciones y balance de masa	85
C.2. Modelo de pseudo-primer orden (PFO/Lagergren)	85
C.3. Modelo de pseudo-segundo orden (PSO/Ho–McKay)	86
C.4. Estimación de parámetros	87
C.5. Criterios de selección y conexión con la señal óptica	87
C.6. Limitaciones	88
D. Actividades Complementarias	89
D.1. Artículos en revistas indexadas	89
D.1.1. Primer Autor	89
D.1.2. Colaboraciones	89
D.2. Congresos	90

Índice de figuras

2.1. Núcleo y revestimiento de una fibra óptica y dimensiones	8
2.2. Ley de Snell considerando: (a) $n_1 > n_2$ (el rayo se aleja de la normal) y (b) $n_1 < n_2$ (el rayo se aproxima a la normal).	10
2.3. Interferómetro de Mach-Zehnder en un entorno de espacio libre	13
3.1. Diagrama leap-frog para la interacción entre campos eléctrico y magnético del método FDTD	33
3.2. Construcción de la geometría del sensor mediante el método FDTD	37
3.3. Simulación del campo electromagnético incidente E.	41
3.4. Respuesta espectral mediante el método FDTD para cada longitud de onda	42
3.5. Diagrama de flujo del proceso FDTD aplicado al interferómetro MZI en fibra <i>adelgazada</i> , siguiendo el pseudocódigo de la sección 3.15.	45
4.1. Estructura del sensor de fibra óptica	47
5.1. Configuración experimental	55
5.2. Espectro baseline para la evaluación de desplazamientos inducidos por variaciones en el pH.	56
5.3. Espectro de detección de cada pH4, pH7 y pH10 para la evaluación de desplazamientos inducidos por variaciones de pH.	57
5.4. Desplazamiento de la potencia de salida de la respuesta del sensor cuando se sumerge en valores de pH de 4, 7 y 10 en un tiempo de 0 a 50 minutos.	58

5.5. Desplazamiento de longitud de onda de la respuesta central del sensor en función del tiempo en un rango de 50 minutos. 59

5.6. Representación esquemática del experimento donde se observan los diferentes adsorbentes: 1) MWCNT-OH; 2) MWCNT-Fe (con Fe nanoparticulas); 3) MWCNT-COOH. 61

A.1. Esquema de actualización en notación compacta equivalente a las ecuaciones de Yee para 2D-FDTD en TM_z 76

Capítulo 1

Introducción y planteamiento del problema

1.1. Motivación

La contaminación por colorantes orgánicos en efluentes acuosos y la necesidad de monitoreo de parámetros fisicoquímicos (pH, índice de refracción, composición química) *in situ* exigen plataformas de sensado rápidas, selectivas y robustas [1–3]. Los sensores de fibra óptica (FO) han ganado terreno frente a alternativas electroquímicas por su *portabilidad, facilidad de operación, alta sensibilidad, tiempo de respuesta rápido, costo accesible* y, muy particularmente, por su *inmunidad al ruido electromagnético* y su capacidad de operar en entornos adversos. Estas ventajas se han consolidado en aplicaciones de monitoreo químico y bioquímico de humedad [4], salinidad y temperatura, así como en biosensado [5], donde los recubrimientos con nanomateriales (CNT, AuNP, GO) potencian la sensibilidad y la selectividad de las FO *tapered* [6].

1.2. Interferómetro de fibra óptica y ventajas de la geometría

Dentro de las estructuras interferométricas en fibra óptica, el **interferómetro de Mach–Zehnder (MZI)** a partir de fibra adelgazada (*tapered*) permite acoplar el modo fundamental y modos de cubierta, generando un patrón espectral de muescas (*notches*) sensible a variaciones de índice de refracción del entorno [7]. En el MZI, la intensidad de salida I_{out} resulta de la interferencia entre los aportes de núcleo y revestimiento, con un desfase $\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta n_{\text{eff}} L$; las posiciones de mínima transmisión cumplen $\lambda_m = \frac{\Delta n_{\text{eff}} L}{m}$ y su desplazamiento $\Delta\lambda_m$ captura cambios de índice de refracción del medio (Δn). Estas interacciones justifican la implementación del MZI como un transductor óptico eficaz para la medición de pH y analitos en soluciones [8–10].

1.3. Propuesta y evidencia preliminar

En esta tesis se adopta una arquitectura MZI implementada en fibra monomodo con **dos secciones cónicas (tapers) concatenadas** [11], fabricadas con procesador Vytran GPX 3400. La geometría comprende transiciones *down-taper* (DT) y *up-taper* (UT) de 1 mm y una cintura (WT) de 40 μm ; la separación entre tapers es de 10 mm. El espectro de referencia (en aire) presenta tres muescas con *extinction ratio* (ER) ~ 16.7 dB en 1520–1600 nm. Los parámetros de fabricación típicos incluyen SP=42 W, PV=1 mm/s, PD=1 ms y FD=−10 %.

Para respaldar el diseño, se han realizado **simulaciones FDTD** de onda completa (Maxwell discretizado) con una *longitud efectiva* de la estructura de ~ 18 mm (dos tapers separados 10 mm, con DT/WT/UT de 1 mm en cada extremo), fuente senoidal 1400–1600 nm y parámetros de índice $n_{\text{núcleo}} = 1.47$, $n_{\text{revestimiento}} = 1.46$.

1.4. Problema de investigación

Para mejorar sensibilidad y selectividad frente a **Alizarin Red S (ARS)** y modular la interacción con el medio, se emplean recubrimientos con *nanotubos de carbono de pared múltiple*

(MWCNT) con diferentes funcionalidades superficiales (-COOH, -OH y MWCNT-Fe) [12–15]. La literatura experimental asociada a la plataforma adjunta reporta que MWCNT-Fe *sobresale* en pH 7–10 mientras que MWCNT-COOH *mejora* la captura en pH 4 (interacciones electrostáticas y puentes de hidrógeno) [16–21]. Se observan **altas eficiencias de remoción** de ARS (96.5–97.2 %) y una **capacidad máxima** tipo Langmuir $Q_{\text{máx}} \approx 192.98 \text{ mg g}^{-1}$ con $K_L \approx 0.0325 \text{ L mg}^{-1}$, así como ajuste Freundlich con $K_F \approx 192.63 \text{ mg g}^{-1}$, lo que avala la viabilidad de integrar *detección y remediación* en una misma plataforma óptica.

1.5. Estado del arte

Los sensores de fibra óptica con regiones adelgazadas (*tapered*) han mostrado un desempeño destacado en la medición de índice de refracción y variables químicas debido a que, en la cintura, una fracción del modo guiado se manifiesta como campo evanescente y puede interactuar directamente con el medio externo. En este tipo de plataformas, la respuesta del sensor depende de manera crítica de parámetros geométricos (por ejemplo, diámetro de cintura y ángulo de adelgazamiento) y del índice del entorno, lo que permite convertir cambios fisicoquímicos del medio en variaciones ópticas medibles. En particular, la integración de recubrimientos basados en nanomateriales ha sido ampliamente explorada como estrategia para incrementar la sensibilidad y, sobre todo, la selectividad del transductor óptico, aprovechando mecanismos como el incremento del área superficial efectiva, la modificación del campo evanescente cercano a la interfaz y la introducción de sitios activos para interacción con analitos (por ejemplo, aproximaciones basadas en LSPR, nanotubos de carbono, óxido de grafeno y nanopartículas metálicas), lo cual también favorece la miniaturización de la instrumentación y su operación *in situ* [22].

Dentro de las arquitecturas interferométricas, el interferómetro Mach-Zehnder implementado en fibra (MZI) representa una alternativa atractiva por su alta sensibilidad a variaciones pequeñas del índice efectivo, que se reflejan en corrimientos espectrales y cambios en el contraste de las muescas. En trabajos recientes orientados a detección en soluciones acuosas, los recubrimientos con nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNT) funcionalizados (por ejemplo, -COOH, -OH o MWCNT-Fe) han mostrado un comportamiento pH-dependiente re-

levante para aplicaciones de sensado químico, al modular tanto la afinidad con el analito como el tipo de interacción dominante (electrostática, puentes de hidrógeno y/o complejación), con diferencias reportadas entre funcionalizaciones según el intervalo de pH. Además, la literatura asociada a plataformas con MWCNT reporta eficiencias de remoción elevadas para colorantes como Alizarin Red S (ARS), junto con parámetros de ajuste mediante isothermas (por ejemplo, Langmuir y Freundlich), lo cual respalda la viabilidad de integrar detección y remediación dentro de un mismo esquema de medición óptica [23].

No obstante, a pesar de los avances, persisten retos relevantes para una adopción robusta en escenarios aplicados. Entre los más importantes se encuentran la estabilidad a corto y mediano plazo (deriva espectral y variaciones de potencia), la selectividad cuando se opera en matrices complejas, la necesidad de calibraciones suficientemente densas para pH y, de manera crítica, el acoplamiento cuantitativo entre la cinética de adsorción (y su dependencia con el pH) y la firma interferométrica medida (por ejemplo, desplazamientos $\Delta\lambda_m$, profundidad de muesca y relación de extinción ER). En consecuencia, existe una oportunidad clara para desarrollar metodologías que conecten, de forma reproducible, los modelos fisicoquímicos de adsorción (cinética e isothermas) con métricas ópticas extraídas del espectro, particularmente en plataformas MZI *tapered* funcionalizadas con recubrimientos activos [24–26].

1.6. Planteamiento del problema

Problema central: ¿Puede una arquitectura MZI de fibra *tapered* funcionalizada con MWCNT proporcionar *sensado estable de pH y detección/seguimiento de ARS* en condiciones cercanas a un entorno industrial, cuantificando de manera reproducible la relación entre adsorción (cinética/isothermas) y respuesta interferométrica?

1.7. Preguntas de investigación

1. ¿Qué geometrías (L, WT, ángulos de taper) maximizan la sensibilidad espectral del MZI manteniendo pérdidas y deriva aceptables?

2. ¿Cómo se correlaciona la cinética/isotermas de ARS (Langmuir/Freundlich) con $\Delta\lambda_m$ y cambios en ER en 1520–1600 nm?
3. ¿Qué funcionalización (COOH, OH, Fe) optimiza sensibilidad, selectividad y reusabilidad en diferentes pH?
4. ¿Qué márgenes de *estabilidad temporal* (potencia y longitud de onda) son alcanzables para monitoreo continuo?

1.8. Hipótesis

La reducción del diámetro de las fibras ópticas en la región de cintura (*taper*) en la fabricación de interferómetros con fibras especializadas incrementa el acoplamiento evanescente y la diferencia de índices efectivos entre caminos ópticos. Como consecuencia, se obtienen muescas espectrales más profundas y estables, lo que posibilita una medición precisa del índice de refracción en diversos medios y permite la determinación exacta del pH a partir del corrimiento de λ_m en 1520–1600 nm.

1.9. Objetivo general

Diseñar y caracterizar un sensor MZI basado en fibra óptica adelgazada funcionalizado con MWCNT para el **monitoreo de pH** y la **detección/adsorción de ARS**, evaluando sensibilidad espectral, estabilidad temporal y reusabilidad.

1.10. Objetivos específicos

1. Modelado del MZI vía FDTD: definición geométrica, fuentes 1400–1600 nm y parámetros de índice; obtención de espectros simulados y de campos.
2. Caracterizar el espectro óptico de fibras con geometrías cónicas, analizando la relación entre su forma y las propiedades espectrales resultantes.

3. Estudiar el comportamiento de fibras ópticas cónicas en ausencia de un medio circundante, estableciendo una base de referencia para el sensado en diferentes aplicaciones

1.11. Aportes esperados

- **Arquitectura MZI tapered** reproducible (1–1–1 mm; WT 40 μm ; separación 10 mm) con *ER* elevado y operación estable en 1520–1600 nm.
- **Integración sensado–remoción:** demostración de detección de pH en presencia de ARS con MWCNT y **remoción** > 96 % con cuantificación *in situ*.

1.12. Alcance y delimitaciones

Este trabajo se centra en el intervalo espectral 1520–1600 nm y en soluciones acuosas bufferizadas a pH 4, 7 y 10. Se consideran tres recubrimientos (MWCNT–COOH, –OH y –Fe) y concentraciones de ARS compatibles con medición UV–Vis. No se abordan matrices industriales complejas ni interferencias múltiples, que se proponen como trabajo futuro.

1.13. Estructura de la tesis

El manuscrito se organiza como sigue:

- **Cap. 2** Marco teórico y estado del arte de sensores FO tapered, MZI y modelos de adsorción.
- **Cap. 3** Modelado FDTD y validación geométrica/espectral del MZI.
- **Cap. 4** Materiales y métodos: fabricación GPX 3400, funcionalización y protocolos de medición.
- **Cap. 5** Resultados: detección de pH y estabilidad temporal del MZI, adsorción de ARS y efecto de la funcionalización (cinética, isothermas, correlación óptica).

- **Cap. 6** Discusión integrada y comparación con el estado del arte.
- **Cap. 7** Conclusiones y trabajo futuro.

Acrónimos

FO	Fibra óptica
MZI	Interferómetro de Mach-Zehnder
WT/DT/UT	Cintura / Down-taper / Up-taper
MWCNT	Nanotubos de carbono de pared múltiple
ARS	Alizarin Red S
FDTD	Finite-Difference Time-Domain
ER	Extinction Ratio

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

2.1. Fundamentos esenciales de la fibra óptica

Una fibra óptica se define como un filamento extremadamente delgado compuesto de un material transparente, ya sea vidrio o plástico, empleado como medio de transmisión para la luz [27–29]. En su configuración básica, la fibra óptica está constituida por un núcleo cilíndrico central de alta pureza que se encuentra recubierto por una capa cuyo índice de refracción (IR) n_2 es ligeramente inferior al índice de refracción n_1 del núcleo como se observa en la figura 2.1. Esta diferencia en los índices de refracción facilita la propagación de la luz mediante el fenómeno de la reflexión total interna [30, 31].

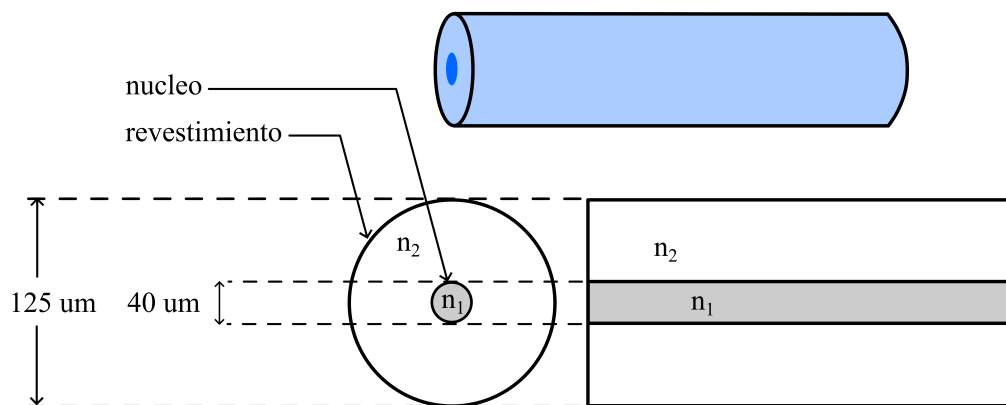


Figura 2.1: Núcleo y revestimiento de una fibra óptica y dimensiones

2.2. Transmisión de la luz a través de la fibra óptica.

Una fibra óptica constituye una guía de onda cilíndrica que captura la luz y facilita su transmisión. La fibra óptica emplea el principio de reflexión total interna para guiar la luz, lo cual resulta de las diferencias en el índice de refracción de los materiales que integran el núcleo, el revestimiento, y el ángulo en que los rayos inciden sobre la interfaz entre núcleo y revestimiento.

De acuerdo con la Ley de refracción, un rayo de luz monocromático experimenta un cambio en su trayectoria al transitar de un medio con un índice de refracción n_1 a otro con un índice de refracción n_2 . Más específicamente, esta ley, también denominada Ley de Snell, establece lo siguiente: El cociente de los senos de los ángulos θ_1 y θ_2 , ambos medidos desde la normal a la superficie de intersección de los materiales 1 y 2, es equivalente al inverso del cociente de los índices de refracción. Esto se representa en la siguiente ecuación matemática:

$$n_1 \sin(\theta_1) = n_2 \sin(\theta_2) \quad (2.1)$$

Los resultados de esta ecuación revelan la desviación experimentada por un haz de luz al atravesar dichos materiales. En las interfaces donde el índice de refracción del primer material es superior al del segundo ($n_1 > n_2$), el rayo se alejaría de la normal, puesto que la velocidad de propagación de la onda luminosa es mayor en el segundo material. En situaciones donde los índices de refracción se presentan como ($n_1 < n_2$), el rayo disminuye su velocidad de propagación al ingresar al material 2, lo que provoca que su trayectoria tienda a aproximarse a la normal; este fenómeno se observa en la Figura 2.2.

A partir de las ecuaciones formuladas en la Ley de Snell, se establece la existencia de un ángulo de incidencia específico, en el cual el rayo refractado adopta una trayectoria que se desvía hacia la interfaz de los materiales (1) y (2), conocido como el "ángulo crítico". El ángulo crítico se define como el límite de incidencia en el cual θ_2 , el ángulo constituido por la trayectoria del rayo refractado, resulta en que el vector normal alcance una magnitud de 90° . Para que un rayo se desvíe hacia la interfaz entre los materiales, es fundamental que la velocidad de propagación de la luz en el material (2) exceda la del material (1).

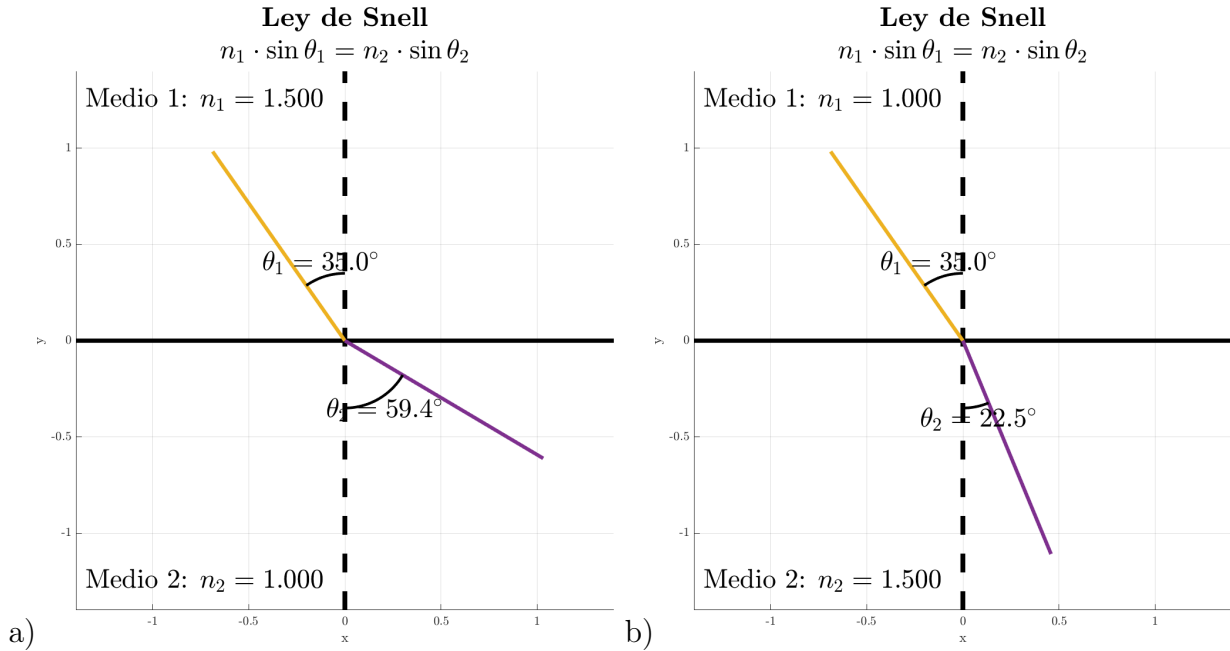


Figura 2.2: Ley de Snell considerando: (a) $n_1 > n_2$ (el rayo se aleja de la normal) y (b) $n_1 < n_2$ (el rayo se aproxima a la normal).

Considerando la ecuación (2.1) y estableciendo que $\theta_2 = 90^\circ$, se obtiene que $\sin \theta_2 = 1$, lo que conduce a la siguiente ecuación:

$$n_1 \sin(\theta_c) = n_2 \sin(90^\circ) = n_2 \implies \sin(\theta_c) = \frac{n_2}{n_1} \quad (2.2)$$

En consecuencia, el ángulo crítico se determinaría como:

$$\theta_c = \theta_1 = \text{sen}^{-1} \frac{n_2}{n_1} \quad (2.3)$$

Es evidente que el ángulo crítico está determinado por la relación entre los índices de refracción de los materiales (1) y (2). Un rayo que incida con un ángulo apenas superior al ángulo crítico resultaría en la reflexión del 100% de la luz de vuelta al material (1). Teniendo en cuenta la disposición geométrica de la fibra óptica, que se configura como líneas paralelas de interfaces entre el núcleo y el recubrimiento, la incidencia de dicho rayo culminaría en la reflexión completa del haz, un fenómeno que se denomina reflexión total interna.

Para capturar eficazmente un haz de luz en las fibras ópticas, se aplica el principio basado

en la refracción de la luz. Es imprescindible determinar la relación entre los índices de refracción en la interfaz aire-núcleo para permitir la entrada de un rayo de luz en una fibra óptica; no obstante, esto no garantiza su captura a lo largo de toda la longitud de la fibra. Dado que la luz se propaga con mayor rapidez en el aire que en cualquier otro medio, con excepción del vacío, el índice de refracción del núcleo se mantendría siempre superior al del aire, provocando así la desviación de un rayo de luz incidente hacia el eje de la fibra y garantizando su penetración en la misma.

En la Figura 2.2a, se observa que los rayos incidentes, representados en azul y verde, pueden ingresar en la fibra óptica; sin embargo, no permanecen en su interior. Es evidente que el ángulo entre la interfaz del núcleo y el recubrimiento es inferior al ángulo crítico, resultando insuficiente para mantener la transmisión interna total. Al examinar el trayecto que describe un rayo al emerger de una fibra óptica, es posible determinar con precisión el ángulo mínimo necesario para inducir la reflexión interna total, y así asegurar la transmisión íntegra del haz.

Si se analiza la trayectoria del rayo emergente de la fibra en sentido inverso, se puede determinar el ángulo preciso que garantiza la captura del haz. A partir de este ángulo se define el ángulo de incidencia mínimo (θ_{min}), y cualquier ángulo inferior permitiría la propagación a lo largo de toda la fibra.

La trayectoria de un rayo de luz que incide en el ángulo crítico experimenta una desviación en su dirección al emerger de la fibra, lo que provoca su alejamiento del eje principal. Al desplazar dicho ángulo hacia el límite del núcleo, es posible determinar el cono de aceptación que permite la transmisión de una señal a través de la fibra, como se ilustra en la Figura 2.2b.

La apertura numérica (NA, por sus siglas en inglés) es un término empleado en la fibra óptica para describir la capacidad de una fibra óptica para capturar luz, la cual se determina mediante la siguiente ecuación matemática.

$$NA = \sqrt{n_1^2 - n_2^2} \quad (2.4)$$

La apertura numérica está vinculada al ángulo de aceptación (θ_{min}) a través de la siguiente ecuación,

$$\theta_{\min} = \sin^{-1}(\text{NA}) \quad (2.5)$$

Una fibra monomodo guía la luz cuando el parámetro normalizado $V = \frac{2\pi a}{\lambda} \sqrt{n_{\text{core}}^2 - n_{\text{clad}}^2}$ es < 2.405 (modo LP_{01}). La solución modal se expresa como superposición

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \sum_m a_m \mathbf{e}_m(x, y) e^{j\beta_m z}, \quad \beta_m = k_0 n_{\text{eff},m}, \quad k_0 = 2\pi/\lambda, \quad (2.6)$$

donde $n_{\text{eff},m}$ es el índice efectivo del modo m . Para guías débilmente confinadas (sílice), una fracción del campo se extiende fuera del revestimiento como *onda evanescente*; su contribución crece al reducir el diámetro efectivo (p. ej., en una cintura *tapered*).

2.3. Interferómetro Mach-Zehnder (MZI)

El interferómetro de Mach-Zehnder (MZI) constituye un instrumento de gran utilidad en la medición de variaciones en los índices de refracción. Su funcionamiento se basa en la división de un haz (DA1) de luz en dos trayectorias distintas: una que actúa como referencia y otra que se expone al medio cuya medición se desea realizar. La interferencia generada por la recombinación de ambas trayectorias permite la detección de variaciones en la fase, lo cual posibilita la identificación de cambios en las propiedades del entorno, tales como el pH o la presencia de contaminantes [32, 33].

El proceso de división de haz se puede describir mediante la transmisión de amplitud y los coeficientes de reflexión del divisor del haz, representados como (t) (transmitancia) y (r) (reflectancia). El haz transmitido procede a la ruta de medición, mientras que el haz reflejado avanza a la ruta de referencia.

2.3.1. MZI de espacio libre

En un MZI de espacio libre, el aire se emplea como medio para la propagación de la luz, por lo que el índice de refracción es $n = 1$. En la Figura 2.3 se muestran los componentes de

dicho MZI: dos divisores de haz (DA1, DA2) y dos espejos (M1, M2) de reflectividad total.

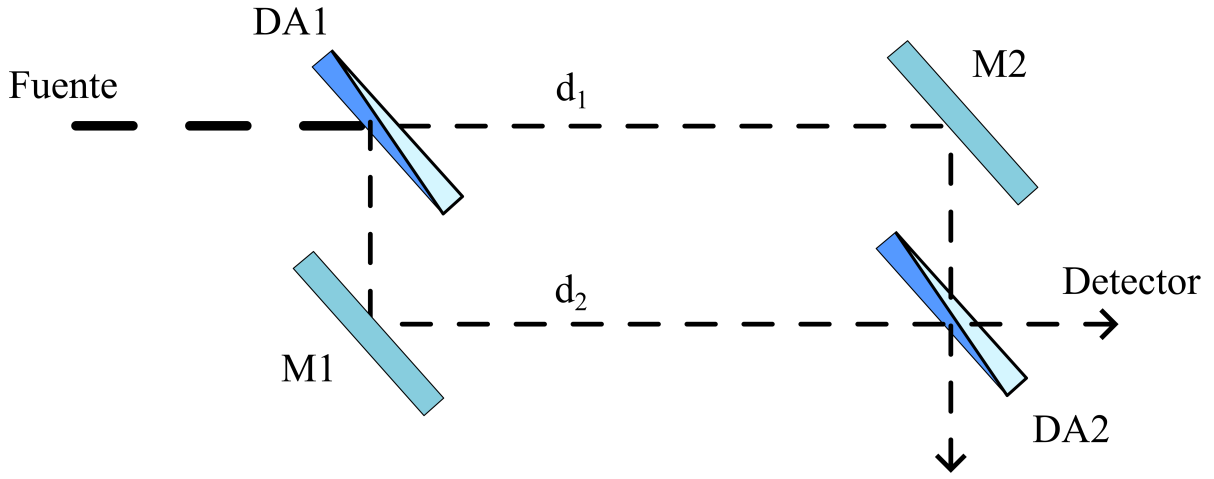


Figura 2.3: Interferómetro de Mach-Zehnder en un entorno de espacio libre

La radiación emitida por una fuente lumínica, al incidir en el divisor de haz DA1, se distribuye en dos trayectorias distintas: la trayectoria d_1 , constituida por el recorrido DA1—M2—DA2, y la trayectoria d_2 , constituida por el recorrido DA1—M1—DA2. Tales trayectorias son susceptibles de experimentar variaciones en su longitud, mediante la modificación de la posición de los espejos M1 y M2. Ambos haces convergen nuevamente en el combinador LS2, donde la diferencia de caminos ópticos (DCO) se expresa como:

$$DCO = d_1 - d_2 \quad (2.7)$$

En caso de que la intensidad de entrada al MZI, representada como I_0 , se divida equitativamente al alcanzar el divisor de haz DA1, la intensidad total I_{tot} , puede expresarse como:

$$I_{tot} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\Delta\phi). \quad (2.8)$$

Para división balanceada del haz, $I_1 = I_2 = I_0/2$, se obtiene:

$$I_{tot} = I_0(1 + \cos(\Delta\phi)) \quad (2.9)$$

donde, δ representa el desfase correspondiente a un haz con longitud de onda λ . En un medio de espacio libre:

Tras recorrer sus respectivos caminos ópticos, las trayectorias del haz son redirigidas hacia un segundo divisor de haz (DA2), donde se recombinan. El cambio de fase introducido durante su trayectoria, particularmente en presencia de índices de refracción variables, puede provocar que los dos caminos ópticos interfieran de manera constructiva o destructiva [34], dependiendo de la diferencia en la longitud óptica (ΔL), definida por:

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda}\delta l \quad (2.10)$$

donde $\Delta\phi$ representa la diferencia de fase y λ corresponde a la longitud de onda de la luz incidente. La intensidad resultante en el detector puede calcularse a través del patrón de interferencia, el cual es susceptible a las variaciones en ΔL y, por ende, en el índice de refracción.

2.3.2. MZI en una fibra óptica

La fabricación de MZI ha evolucionado a través de diversas técnicas, tales como [31,35–37]: la unión de segmentos de fibra óptica con diámetros de núcleo dispares, el adelgazamiento de secciones de fibra, el desplazamiento del núcleo, el colapso de vacíos en fibras de cristal fotónico y la cascada de rejillas de período largo, entre otros. Dado que el índice de refracción del núcleo y el del revestimiento difieren, la velocidad de propagación de cada modo también varía, lo que genera un desfase entre los mencionados modos de propagación. Cuando se produce el reacoplamiento entre los modos del núcleo y el revestimiento, la intensidad total I de un MZI intermodal puede ser expresada como:

$$I = I_{co} + I_{cl(i)} + \sum_m 2\sqrt{I_{co}I_{cl(i)}} \cos(\Delta\phi) \quad (2.11)$$

donde I_{co} indica la intensidad del campo eléctrico del modo que transita a través del núcleo, mientras que $I_{cl(i)}$ corresponde a la intensidad del campo eléctrico del i -ésimo modo que se desplaza a través del revestimiento. La diferencia de fase entre I_{co} y $I_{cl(i)}$ se calcula por [38]:

$$\Delta\phi_i = 2\pi \frac{\Delta n_{\text{eff}}(i)L}{\lambda} \quad (2.12)$$

donde L es la longitud del MZI, λ es la longitud de onda en el vacío, $n_{\text{eff}}(i)$ corresponde a la diferencia del índice de refracción efectivo entre el núcleo y el revestimiento para el modo i -ésimo. La diferencia del índice de refracción efectiva entre el núcleo y el revestimiento se define como:

$$\Delta n_{\text{eff}}(i) = n_{\text{eff}_{\text{co}}} - n_{\text{eff}_{\text{cl}}} \quad (2.13)$$

donde $n_{\text{eff}_{\text{co}}}$ representa el índice de refracción efectivo del núcleo, mientras que $n_{\text{eff}_{\text{cl}}}$ denota el índice de refracción efectivo del revestimiento y el *free spectral range* (FSR) puede aproximarse por

$$\text{FSR}(\lambda) \approx \frac{\lambda^2}{\Delta n_{\text{eff}} L}. \quad (2.14)$$

Muecas con *relación de extinción* (ER) alta mejoran la detectabilidad de pequeños corrimientos espectrales (Cap. 1; [22]).

2.3.3. Sensores de fibra óptica

Los sensores de fibra óptica (SFO) se han consolidado como una tecnología esencial en una amplia gama de aplicaciones, que abarcan desde el ámbito médico hasta el de la ingeniería civil, debido a sus principios fundamentales y ventajas intrínsecas [39, 40]. Los SFO se fundamentan en la transmisión de luz a través de fibra óptica, donde la luz puede experimentar modulación debido a alteraciones en el entorno, tales como variaciones de temperatura, presión o deformaciones [41, 42].

Una de las principales ventajas de los SFO es su resistencia a las interferencias electromagnéticas. En contraste con los sensores convencionales que emplean cables de cobre u otro tipo de metales, los SFO presentan inmunidad a interferencia electromagnética, característica que los convierte en una opción óptima para su aplicación en entornos con elevada interferencia electromagnética, como en instalaciones industriales o en el ámbito de las telecomunicaciones.

Además, presentan ventajas adicionales como su reducido tamaño, pasividad eléctrica, alta biocompatibilidad, alta sensibilidad, respuesta rápida y la capacidad de detección distribuida a lo largo de un único filamento de fibra óptica [43, 44].

Los SFO pueden ser categorizados en diversas tipologías, de las cuales los más comunes son los interferométricos y aquellos basados en rejillas de Bragg. Los sensores interferométricos, tales como los dispositivos de Mach-Zehnder y Michelson, emplean la interferencia de la luz para detectar variaciones en el entorno [45, 46].

Particularmente, los sensores tipo Mach-Zehnder y Michelson han ganado prominencia en diversas aplicaciones de medición debido a su notable sensibilidad y precisión. Ambos tipos de sensores operan bajo el principio de interferencia de la luz, donde se utilizan dos caminos ópticos (CO) para dividir y recombinar la luz, permitiendo detectar cambios minúsculos en parámetros como longitud, temperatura y presión [47, 48]. El interferómetro de Mach-Zehnder (MZI) es altamente valorado por su sensibilidad superior en la detección de señales débiles, lo cual lo establece como una opción óptima para aplicaciones que demandan mediciones precisas. Se ha investigado, por ejemplo, su utilidad en la detección de vibraciones y desplazamientos, donde su diseño facilita la integración en diversos entornos [49, 50].

2.4. Onda evanescente y fibras adelgazadas

En sensores MZI de fibra óptica con regiones adelgazadas (tapered fiber), una fracción del modo guiado se extiende más allá del núcleo en forma de una onda evanescente, lo que posibilita su interacción con el entorno circundante. Este fenómeno se aprovecha en estos dispositivos para incrementar la sensibilidad hacia las variaciones en el índice de refracción del medio externo.

El fenómeno por el cual los modos guiados se extienden fuera del núcleo como ondas evanescentes está significativamente influenciado por las propiedades y geometrías de las fibras ópticas, particularmente en las fibras cónicas. Las fibras ópticas cónicas mejoran su interacción con el medio circundante debido a los fuertes campos evanescentes producidos en sus superficies, que son cruciales para aplicaciones en la detección. Estas ondas evanescentes permiten que la luz penetre en el medio adyacente, facilitando varias interacciones como cambios en el

índice de refracción.

El diseño cónico influye en la propagación de la luz al convertir los modos guiados dentro del núcleo de la fibra en ondas evanescentes fuera de la fibra, aumentando el acoplamiento del campo óptico con el entorno. Esta característica se explota en numerosas aplicaciones, entre las cuales se encuentran los sensores que emplean el campo evanescente para incrementar la sensibilidad hacia los analitos de índole química o biológica. Las fibras cónicas son capaces de sustentar campos evanescentes de gran intensidad, lo que intensifica su interacción con el entorno [51, 52].

2.5. Sensibilidad a índice de refracción y pH

Cambios en el entorno (δn_{ext}) alteran n_{eff} y producen corrimientos

$$\delta \lambda_m \approx \frac{L}{m} \frac{\partial \Delta n_{\text{eff}}}{\partial n_{\text{ext}}} \delta n_{\text{ext}}. \quad (2.15)$$

La **sensibilidad al IR** $S_{\text{IR}} = \partial \lambda_m / \partial n_{\text{ext}}$ y la **sensibilidad a pH** $S_{\text{pH}} = \partial \lambda_m / \partial \text{pH}$ se obtienen por regresión local cuando Δn_{eff} varía suavemente. En práctica, se calibra λ_m vs. pH y se reporta S_{pH} (nm/pH) con R^2 e IC 95 %.

2.6. Sensibilidades cruzadas: temperatura y deformación

El desplazamiento térmico proviene del coeficiente termoóptico de la sílice y la expansión térmica. Una cota práctica es

$$\left| \frac{\partial \lambda}{\partial T} \right| \lesssim \frac{\lambda}{\Delta n_{\text{eff}}} \left| \frac{\partial \Delta n_{\text{eff}}}{\partial T} \right| + \frac{\lambda}{L} \alpha_L. \quad (2.16)$$

donde α_L es el coeficiente de expansión lineal de la fibra, el diseño (cintura y L) y la fijación mecánica mitigan, respectivamente, la sensibilidad de la temperatura y la microtensión (ver Cap. 5 y [22]).

2.7. Métricas espectrales y de desempeño

La *resolución* del sistema de interrogación, denotada como $\delta\lambda$, representa el cambio mínimo de longitud de onda que puede discriminarse de manera confiable con el instrumento de medida (por ejemplo, un analizador de espectro óptico) y el método de procesamiento empleado. En la práctica, $\delta\lambda$ puede asociarse a la separación mínima entre puntos consecutivos del espectro (paso de muestreo) o a la resolución nominal del instrumento; por tanto, establece un límite inferior en la precisión con la que se estima la posición de la muesca λ_m . En este trabajo, $\delta\lambda$ se utiliza como parámetro para evaluar la incertidumbre de lectura y, en conjunto con la sensibilidad S_x , para estimar el desempeño metrológico del sensor.

La *relación de extinción* (**ER**) cuantifica el contraste de la interferencia y se define como la razón entre la potencia máxima y mínima asociada a una muesca o franja espectral. En unidades logarítmicas (dB), puede expresarse como:

$$\text{ER} = 10 \log_{10} \left(\frac{P_{\text{máx}}}{P_{\text{mín}}} \right), \quad (2.17)$$

donde $P_{\text{máx}}$ y $P_{\text{mín}}$ representan, respectivamente, la potencia máxima y mínima en la vecindad de la muesca considerada.

El *ancho a media altura* (**FWHM**, por sus siglas en inglés) describe la anchura espectral de la muesca y se define como la separación en longitud de onda entre los dos puntos donde la potencia alcanza el nivel intermedio entre el mínimo de la muesca y el nivel de referencia local. En términos de potencia, este criterio equivale al nivel de *media potencia* (aprox. -3 dB respecto al nivel de referencia), por lo que el FWHM se reporta en nm y se obtiene directamente del espectro medido.

El *límite de detección* (**LOD**) representa el cambio mínimo de la magnitud medida x (p. ej., pH, concentración, índice de refracción o temperatura) que puede distinguirse del ruido del sistema. Por su parte, el *límite de cuantificación* (**LOQ**) corresponde al valor mínimo de x a partir del cual la medición puede cuantificarse con una incertidumbre aceptable. En sensores basados en el rastreo espectral de una muesca (por ejemplo, la estimación de λ_m), estas métricas

pueden aproximarse como:

$$\text{LOD}_x = \frac{3\sigma_\lambda}{S_x}, \quad \text{LOQ}_x = \frac{10\sigma_\lambda}{S_x}, \quad (2.18)$$

donde $S_x = \Delta\lambda/\Delta x$ es la sensibilidad (nm por unidad de x) y σ_λ es la desviación estándar de la estimación de λ_m obtenida a partir de mediciones repetidas o de pruebas de estabilidad temporal.

2.8. Modelado numérico transversal y extracción de n_{eff}

Con el fin de relacionar la respuesta espectral del interferómetro con las propiedades modales de la fibra, se implementó un modelado numérico en dos dimensiones ($2D$) considerando únicamente la **sección transversal** (x - y) de la estructura. En este enfoque se asume invariancia geométrica a lo largo del eje de propagación z , por lo que **no se modelaron transiciones cónicas ni variaciones axiales** del dispositivo.

El efecto del *adelgazamiento* (*taper*) se incorporó mediante una **reducción geométrica en la sección transversal**, es decir, se representó la región de cintura como una fibra con menor diámetro efectivo. De esta forma, el “taper” se interpreta como un cambio paramétrico de la geometría transversal que modifica el confinamiento del campo y, en consecuencia, los índices efectivos de los modos guiados.

Para cada geometría transversal (diámetro efectivo) y para cada longitud de onda de interés, se estimó el índice efectivo n_{eff} de los modos relevantes, a partir de su constante de propagación β :

$$n_{\text{eff}} = \frac{\beta}{k_0}, \quad k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (2.19)$$

Con los valores obtenidos se calcula la diferencia modal

$$\Delta n_{\text{eff}} = n_{\text{eff,co}} - n_{\text{eff,cl}}, \quad (2.20)$$

que se utiliza posteriormente para reconstruir la fase interferométrica del MZI:

$$\Delta\phi(\lambda) = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta n_{\text{eff}}(\lambda) L. \quad (2.21)$$

Este modelo transversal permite analizar de manera eficiente el impacto del adelgazamiento (representado como reducción geométrica) sobre n_{eff} y, por tanto, sobre el corrimiento de las muescas espectrales. Sin embargo, al no incluir la variación axial, el enfoque no describe explícitamente los procesos de acoplamiento gradual y pérdidas en las regiones de transición del taper; por ello, su propósito principal es capturar la tendencia modal y la contribución de Δn_{eff} en la respuesta interferométrica.

2.9. Nanotubos de carbono (MWCNTs)

Los nanotubos de carbono de paredes múltiples (MWCNTs) presentan una elevada área superficial, excelente estabilidad química y propiedades ópticas singulares. Estas propiedades los convierten en materiales sumamente idóneos para aplicaciones en remediación ambiental y en el desarrollo de sensores. La funcionalización de las superficies de los MWCNT mediante técnicas como la hidroxilación ($-\text{OH}$), la carboxilación ($-\text{COOH}$) y la incorporación de nanopartículas puede incrementar significativamente su eficacia en la adsorción de compuestos tóxicos, tales como los tintes peligrosos presentes en las aguas residuales [53, 54].

Diversos estudios demuestran que los MWCNT poseen una alta capacidad de adsorción para varios tintes orgánicos debido a sus mecanismos de interacción únicos con los contaminantes. Por ejemplo, la adsorción de colorantes como el azul de metileno y otros compuestos aniónicos se mejora a través de atracciones electrostáticas, mejorada por la funcionalización que altera las características de carga de las superficies MWCNT [55]. Las isothermas de adsorción y la cinética de la adsorción de tinte por MWCNT se rigen por principios termodinámicos, que respaldan el uso de modelos Langmuir y Freundlich para predecir el comportamiento de adsorción en condiciones ambientales variables [54, 56]. Las diferencias en las capacidades de adsorción de diversos tintes, especialmente en sistemas de tinte mixto o binario, indican la existencia de

interacciones sinérgicas y competitivas que pueden ser explotadas para desarrollar estrategias óptimas de eliminación de contaminantes.

2.9.1. Funcionalización y acoplamiento físico-óptico

Recubrimientos con **MWCNT** (COOH, OH y MWCNT-Fe) alteran (i) la interfaz óptica (capa efectiva, rugosidad, dispersión superficial) y (ii) la **química** del medio (adsorción del analito), cambiando n_{ext} y, por ende, λ_m . La literatura experimental vinculada a esta tesis reporta *muestras profundas*, estabilidad temporal y, en presencia de ARS, *corrimientos* coherentes con la cinética de captura, con eficiencias de remoción superiores al 96 % y capacidades de monocapa del orden de $Q_{\text{máx}} \approx 193 \text{ mg g}^{-1}$ [22, 23].

2.10. Colorante Alizarin Red S (ARS)

El colorante Alizarin Red S (ARS), perteneciente a la familia de tintes aniónicos conocidos como antraquinonas, se emplea extensamente en la industria textil debido a su capacidad de proporcionar coloraciones vibrantes y su notable estabilidad. No obstante, estas características plantean desafíos considerables para la salud ambiental y pública. Según varios estudios, la persistencia de los AR en las aguas residuales requiere la implementación de métodos efectivos de detección y eliminación para mitigar sus efectos perjudiciales en los ecosistemas acuáticos y la salud humana [57, 58]. La interacción entre ARS y los MWCNT presenta una vía prometedora para desarrollar nuevas estrategias de detección y eliminación. Estos MWCNT funcionalizados se han integrado con éxito en sensores de fibra óptica, donde la presencia de colorantes capturados produce cambios detectables en las características ópticas de las fibras (Herrera et al., 2017). Esta integración aprovecha las propiedades ópticas únicas de los MWCNT, que permite la detección sensible de las concentraciones de tinte en las aguas residuales [59].

2.11. Modelos de adsorción

Para caracterizar el comportamiento de adsorción de contaminantes, tales como los colorantes aniónicos en MWCNT, resulta fundamental emplear modelos de adsorción que describen la interacción entre el adsorbato y el adsorbente. En este contexto, dos modelos de relevancia son las isothermas de Langmuir y Freundlich, las cuales proporcionan valiosa información acerca de la capacidad y los mecanismos de adsorción.

El modelo Langmuir supone que la adsorción ocurre en sitios homogéneos específicos dentro del adsorbente, lo que resulta en la formación de una monocapa uniforme del adsorbato. Este modelo puede estar representado por la ecuación:

$$\frac{C_e}{Q_e} = \frac{1}{Q_{\max}KL} + \frac{C_e}{Q_{\max}} \quad (2.22)$$

donde (C_e) es la concentración de equilibrio del adsorbato, (Q_e) es la cantidad de adsorbato por unidad de masa de adsorbente en equilibrio, (Q_{\max}) es la capacidad máxima de adsorción, y (KL) es la constante de Langmuir relacionada con la afinidad de los sitios de unión [60]. Los estudios que emplean el modelo Langmuir han demostrado buenos ajustes para la adsorción de varios tintes en MWCNT, lo que indica que la superficie es uniforme energéticamente para la adsorción y respalda la noción de cobertura de monocapa [61].

El *factor de separación* de Langmuir $R_L = 1/(1+K_L C_0)$ evalúa favorabilidad (0–1). Cambios transitorios en C_t (por adsorción) inducen $\delta n_{\text{ext}}(t)$ y, vía (2.15), un $\delta \lambda_m(t)$ medible *in situ*. Este acoplamiento justifica el uso del MZI como *transductor óptico* de procesos de remoción [23].

En contraposición, el modelo de Freundlich incorpora la heterogeneidad inherente de la superficie adsorbente, posibilitando la existencia de múltiples sitios de adsorción con afinidades variables hacia el adsorbato. La isoterma de Freundlich se puede expresar como:

$$\ln Q_e = \ln K_F + \frac{1}{n} \ln C_e \quad (2.23)$$

donde (K_F) denota el indicativo constante de Freundlich de la capacidad de adsorción, y (n) es la intensidad de adsorción. Un valor más bajo (n) indica una afinidad más fuerte por el

adsorbato, mientras que un valor entre 1 y 10 sugiere un escenario de adsorción favorable [62].

La aplicabilidad del modelo Freundlich es particularmente pronunciada cuando se trata de mezclas complejas de tinte o cuando se produce la adsorción en una gama de energías en superficies heterogéneas [63,64].

Los MWCNT exhiben capacidades de adsorción de tinte significativamente mejoradas en comparación con los adsorbentes tradicionales. Los compuestos altamente porosos pueden eliminar efectivamente los tintes de las aguas residuales a través de interacciones sinérgicas que involucran fuerzas de van der Waals e interacciones de grupo funcional [60]. De manera similar, las modificaciones de MWCNT, tales como la funcionalización con grupos amina o carboxilo, favorecen una mejora en las propiedades de adsorción mediante la provisión de sitios activos adicionales para la captura de tinte. [65] Los modelos de isoterma indican que tanto el modelo de Langmuir como el de Freundlich son capaces de describir el comportamiento de adsorción en función de las especificidades del sistema.

2.12. Síntesis y lineamientos para el diseño

1. Aumentar L eleva S_{RI} pero reduce FSR (Ecs. 2.15 y 2.14); elegir L para evitar superposición de muescas.
2. Reducir la cintura incrementa el campo evanescente (mayor $\partial\Delta n_{\text{eff}}/\partial n_{\text{ext}}$) y ER, pero eleva pérdidas y sensibilidad a microcurvatura.
3. Maximizar visibilidad γ (balance modal) mejora ER y disminuye la incertidumbre de ajuste de λ_m .
4. Control térmico y fijación mecánica reducen sensibilidades cruzadas; el *pipeline* de rastreo y suavizado reduce σ_λ , mejorando LOD/LOQ.

2.13. Resumen

Los sensores de fibra óptica son cruciales en aplicaciones médicas y de ingeniería, debido a su resistencia a interferencias electromagnéticas y su alta sensibilidad. Utilizan la transmisión de luz para detectar variaciones en diferentes medios. Los interferómetros, como MZI, son apreciados por su sensibilidad y precisión en mediciones. Los MZI funcionan mediante la división de la luz en caminos ópticos que se recombinan para detectar cambios en el entorno, como en índices de refracción.

MZI pueden mejorar su sensibilidad al usar fibras ópticas cónicas que incrementan la interacción con el entorno mediante campos evanescentes. Asimismo, los MWCNTs son eficaces en la adsorción de contaminantes, debido a su gran área superficial y propiedades ópticas. La funcionalización de MWCNTs mejora su capacidad de adsorción, empleándose en sensores de fibra óptica para detectar y eliminar colorantes en aguas residuales.

Modelos como Langmuir y Freundlich describen las interacciones de adsorción entre tintes y MWCNTs, mostrando cómo diferentes condiciones ambientales afectan la adsorción. El método FDTD permite simular la propagación de ondas electromagnéticas en sensores MZI, destacando su aplicación para analizar cómo influyen las variaciones del entorno en el sensor.

En conclusión, la combinación de interferometría, nanotecnología y simulación computacional proporciona una base sólida para desarrollar sensores que detectan la eliminación de contaminantes ambientales.

Convenciones y símbolos

L	Longitud efectiva entre acoplos (mm)
λ_m	Longitud de onda del mínimo m (nm)
Δn_{eff}	Diferencia de índices efectivos entre caminos (-)
FSR	<i>Free spectral range</i> (nm)
ER	Relación de extinción de la muesca (dB)
$S_{\text{RI}}, S_{\text{pH}}$	Sensibilidades a RI y pH (nm/RIU; nm/pH)
σ_λ	Desv. estándar de la estimación de λ_m (nm)

Capítulo 3

Modelado numérico (FDTD)

3.1. Objetivo

El objetivo de este capítulo es predecir, mediante *Finite-Difference Time-Domain* (FDTD), la respuesta espectral del MZI realizado en fibra *tapered*. Se modela: (i) el acoplamiento modal inducido por las transiciones cónicas, (ii) la propagación y recombinación a lo largo de la región efectiva L , y (iii) el efecto del índice externo n_{ext} sobre el desfase y la posición de muescas (*notches*). Se emplea un esquema de simulación híbrido: FDTD para obtener parámetros de dispersión modal en geometrías locales, y una reconstrucción interferométrica (matriz de transferencia) a partir de n_{eff} y las pérdidas por tramo.

3.2. Método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD)

El método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) constituye una técnica numérica robusta y ampliamente utilizada en las simulaciones de propagación de ondas electromagnéticas, especialmente en geometrías complejas. Este método resulta particularmente valioso en el análisis de sensores MZI que incorporan fibras cónicas, puesto que permite examinar la interacción entre los modos fundamentales y los modos linealmente polarizados, así

como la manera en que estas interacciones provocan alteraciones espectrales en respuesta a las variaciones en el índice de refracción del entorno circundante al sensor.

FDTD funciona discretizando tanto el tiempo como el espacio para resolver las ecuaciones de Maxwell, lo que permite el análisis del comportamiento de las ondas electromagnéticas en varios medios y configuraciones [66, 67] Han et al. (2024). Este aspecto reviste particular importancia en aplicaciones que incorporan sensores MZI, en las cuales resulta crucial asegurar la precisión en el acoplamiento de modos y la consideración de los efectos de interferencia. La capacidad de FDTD para modelar las complejidades geométricas de las fibras cónicas permite una investigación detallada sobre cómo los parámetros ambientales cambiantes influyen en el sensor. Con la variación del índice de refracción en las proximidades del sensor, las simulaciones FDTD ofrecen un análisis visual y cuantitativo consistente de la propagación e interacción del modo, resaltando las alteraciones en las características espectrales que coinciden con las modificaciones del entorno.

El método FDTD implementa una discretización del dominio computacional utilizando una malla, permitiendo el cálculo de los componentes del campo eléctrico y magnético en cada nodo y en cada incremento temporal. Este método captura eficientemente la propagación de ondas electromagnéticas a través de distintos medios, lo cual es fundamental para el análisis de los modos en sensores MZI.

Para aplicar el método FDTD, discretizamos las ecuaciones de Maxwell en una cuadrícula. Los pasos clave incluyen:

- Discretización espacial: establece una malla tridimensional donde los componentes del campo eléctrico y magnético sean evaluados en puntos espaciales alternados (utilizando la cuadrícula o malla de Yee) :

$$E_x^{i,j,k}, \quad H_y^{i,j,k}, \quad H_z^{i,j,k} \tag{3.1}$$

Aquí, (E_x) se calcula en los puntos de la cuadrícula $((i, j, k))$ mientras (H_y) y (H_z) se calculan en los puntos circundantes.

El algoritmo de Yee emplea una disposición de cuadrícula escalonada, donde se asignan componentes del campo eléctrico a ubicaciones específicas de la cuadrícula y componentes del campo magnético a ubicaciones adyacentes. Esta configuración es fundamental para preservar un esquema de avance temporal que captura de manera efectiva la interacción entre los campos eléctricos y magnéticos [68, 69]. En consecuencia, los diversos componentes de campo se actualizan en pasos alternos de medio tiempo.

Los componentes de campo eléctrico (\mathbf{E}) se calculan en un conjunto de puntos de cuadrícula y los componentes de campo magnético (\mathbf{H}) se calculan en un conjunto diferente de puntos de cuadrícula intercalados [70].

El algoritmo de Yee ha sido implementado exitosamente en contextos que implican materiales anisotrópicos, con adaptaciones específicas al esquema tradicional que posibilitan el modelado preciso de la propagación de ondas en medios dieléctricos complejos [71].

- Discretización temporal: se establecen los intervalos de tiempo, comúnmente indicados por (n) , donde $(t_n = n\Delta t)$. Para cada intervalo, es posible formular ecuaciones de actualización referentes a cada componente del campo, basándose en los intervalos de tiempo precedentes.

De igual manera, el algoritmo FDTD genera ecuaciones de actualización iterativa para los campos eléctrico y magnético [72, 73]:

- Para el campo eléctrico

$$Ez^{n+1} = Ez^n + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left(\frac{Hx^n - Hx^{n-1}}{\Delta y} - \frac{Hy^n - Hy^{n-1}}{\Delta x} \right) \quad (3.2)$$

- Para el campo magnético

$$\begin{aligned} Hx^{n+1} &= Hx^n + \frac{\Delta t}{\mu} \left(\frac{Ez^n - Ez^{n-1}}{\Delta x} \right) \\ Hy^{n+1} &= Hy^n + \frac{\Delta t}{\mu} \left(\frac{Ez^n - Ez^{n-1}}{\Delta y} \right) \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde, (Δt) es el tamaño de paso de tiempo, $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ son el espacio de la cuadrícula en las dimensiones respectivas, (ϵ) es la permitividad del medio, (μ) es la permeabilidad del medio.

La metodología FDTD es utilizada en el modelado de las interacciones de las ondas electromagnéticas con materiales tanto lineales como no lineales. Este enfoque se emplea para investigar las características de propagación y dispersión de las ondas electromagnéticas, demostrando así su versatilidad más allá de los materiales dieléctricos convencionales [74].

3.3. Ecuaciones de Maxwell y actualización Yee

En medio lineal, isótropo y no dispersivo, las ecuaciones de Maxwell se escriben como

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon_0 \epsilon_r(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma(\mathbf{r}) \mathbf{E}, \quad (3.5)$$

donde ϵ_r incluye el perfil de índices del núcleo, revestimiento y medio externo. La discretización en la **mall**a de **Yee** separa espacialmente E y H (semi-escalonados), con actualizaciones explícitas, p. ej. para el componente E_z en 3D:

$$E_z^{n+1}(i, j, k) = C_e E_z^n(i, j, k) + C_h \left[(H_y^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i-1, j, k)) - (H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j-1, k)) \right],$$

con coeficientes C_e y C_h que incorporan ϵ_r y σ . Los restantes componentes se actualizan de forma análoga.

3.3.1. Condición de estabilidad de Courant

El paso temporal debe satisfacer

$$\Delta t \leq S \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}, \quad 0 < S \leq 1,$$

con c la velocidad de la luz en el vacío y S el *Courant factor*. En la práctica se usa $S \simeq 0.9$. En primer lugar, se revisa el caso tridimensional (3D); no obstante, en el presente trabajo se emplea el caso bidimensional (2D).

3.4. Dominio computacional, malla y fronteras

3.4.1. Dominio 2D y subdominios

El dominio incluye: (i) transición *down-taper* (DT), (ii) cintura (WT), (iii) tramo recto de separación efectiva L , y (iv) transición *up-taper* (UT). Para capturar el campo evanescente, se rodea la fibra por una *capa de líquido* de espesor suficiente (1–2 diámetros de cintura) con índice n_{ext} .

3.4.2. Resolución espacial

Para minimizar la dispersión numérica:

$$\Delta_{\text{mín}} \leq \frac{\lambda_0}{10 n_{\text{máx}}} \quad (\text{típico}) \quad \text{o} \quad \frac{\lambda_0}{15-20 n_{\text{máx}}} \quad (\text{exigente}),$$

donde $n_{\text{máx}}$ es el índice máximo del problema. En la cintura ($\sim 40 \mu\text{m}$) se emplea **malla local refinada** (*mesh override*) mientras que en regiones alejadas se emplea una malla más gruesa para reducir costo.

3.4.3. Condiciones de frontera: PML

Se implementan **Perfectly Matched Layers** (PML) en las seis caras del dominio (10–12 celdas) con *grading* polinómico de conductividad para evitar reflexiones espurias.

3.5. Dominio computacional, malla y fronteras (2D–FDTD)

3.5.1. Justificación del modelo 2D

Las simulaciones electromagnéticas se llevaron a cabo mediante **FDTD en 2D** sobre la sección transversal (x – y) de la fibra. Esta elección se sustenta en que: (i) la estructura es *cuasi axisimétrica* y *lentamente variante* a lo largo de z (tapers adiabáticos), (ii) el sensor opera en régimen de guía débil (sílice) y (iii) el objetivo del modelo es *extraer $n_{\text{eff}}(\lambda)$ y su variación con n_{ext}* para reconstruir la fase interferométrica. Bajo estos supuestos, el enfoque 2D permite capturar con fidelidad el *acoplamiento evanescente* y la dependencia de n_{eff} con el entorno, manteniendo un costo computacional razonable [25, 26, 75].

Para incorporar el adelgazamiento (*taper*), se adoptó un esquema *multi-slice* : la geometría a lo largo de z se discretiza en tramos donde el radio es aproximadamente constante; en cada tramo se calcula $n_{\text{eff}}(\lambda)$ mediante 2D–FDTD y la **fase acumulada** se obtiene por integración

$$\Delta\phi(\lambda) = \frac{2\pi}{\lambda} \int_0^L \Delta n_{\text{eff}}(z, \lambda) dz,$$

que después se inserta en el modelo interferométrico (Sec. 3) para predecir $T(\lambda)$ y la posición de muescas. Este flujo es estándar en literatura de FDTD y guía de ondas cuando la variación axial es suave [25, 75] y ha sido utilizado como apoyo al diseño experimental en nuestros trabajos.

3.6. Ecuaciones de Maxwell discretizadas y malla de Yee (2D–FDTD)

3.6.1. Recordatorio continuo

En medios lineales e isótropos (sin dispersión explícita), las ecuaciones de Maxwell en forma rotacional son

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3.6)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma \mathbf{E}, \quad (3.7)$$

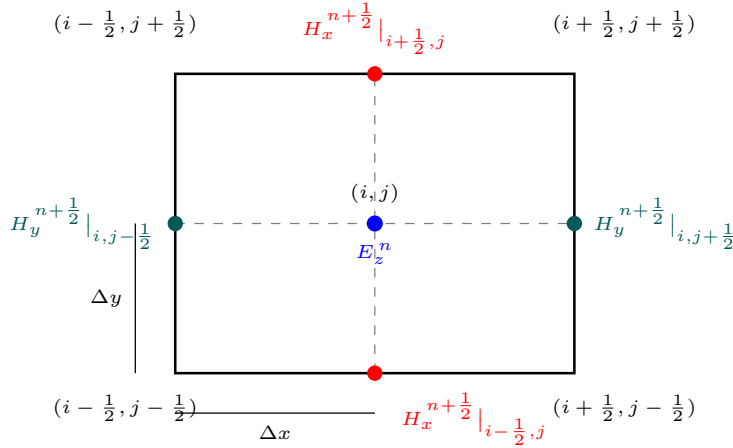
donde $\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \epsilon_r$, $\mu(\mathbf{r}) = \mu_0 \mu_r$ y $\sigma(\mathbf{r})$ es la conductividad efectiva (pérdidas). En 2D con invariancia a lo largo de z , se emplean las descomposiciones TM_z o TE_z [24, 25, 75].

3.6.2. Malla de Yee y esquema *leap–frog*

La **malla de Yee** coloca los componentes de \mathbf{E} y \mathbf{H} intercalados (espacial y temporalmente) para aproximar los rizoides con diferencias centrales y mantener una actualización explícita y estable. En 2D:

- TM_z : $\{E_z, H_x, H_y\}$ no nulos.
- TE_z : $\{H_z, E_x, E_y\}$ no nulos.

El tiempo se avanza en semipasos: los campos H se actualizan en $t^{n+\frac{1}{2}}$ a partir de E^n , y luego E^{n+1} a partir de $H^{n+\frac{1}{2}}$ (*leap–frog*) como se observa en la Figura 3.1. El muestreo espacial típico (en rejilla cartesiana con pasos $\Delta x, \Delta y$) sitúa E en bordes de celda y H en centros de caras para cerrar los bucles de rotacional con estenciles compactos.



- E_z en el centro de la celda (i, j) en un tiempo $n\Delta t$
- H_x en los bordes horizontales en $n + \frac{1}{2}$
- H_y en los bordes verticales en $n + \frac{1}{2}$

Figura 3.1: Diagrama leap-frog para la interacción entre campos eléctrico y magnético del método FDTD

3.6.3. Discretización 2D para modo TM_z (usado con frecuencia en sección transversal)

En TM_z los campos no nulos son E_z, H_x, H_y . Las ecuaciones discretas con diferencias centrales (índices enteros i, j para celda; semienteros para posiciones desplazadas) quedan:

Actualización de H (en $t^{n+\frac{1}{2}}$):

$$H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) = H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) - \frac{\Delta t}{\mu(i, j + \frac{1}{2}) \Delta y} [E_z^n(i, j + 1) - E_z^n(i, j)], \quad (3.8)$$

$$H_y^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j) = H_y^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j) + \frac{\Delta t}{\mu(i + \frac{1}{2}, j) \Delta x} [E_z^n(i + 1, j) - E_z^n(i, j)]. \quad (3.9)$$

Actualización de E_z (en t^{n+1}) con pérdidas σ : Definiendo

$$C_e(i, j) = \frac{1 - \frac{\sigma(i, j) \Delta t}{2\epsilon(i, j)}}{1 + \frac{\sigma(i, j) \Delta t}{2\epsilon(i, j)}}, \quad C_{hx}(i, j) = \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j) \Delta x} \frac{1}{1 + \frac{\sigma(i, j) \Delta t}{2\epsilon(i, j)}}, \quad C_{hy}(i, j) = \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j) \Delta y} \frac{1}{1 + \frac{\sigma(i, j) \Delta t}{2\epsilon(i, j)}},$$

la ecuación de actualización es

$$\begin{aligned}
 E_z^{n+1}(i, j) = & C_e(i, j) E_z^n(i, j) + C_{hx}(i, j) \left[H_y^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j) \right] \\
 & - C_{hy}(i, j) \left[H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j - \frac{1}{2}) \right].
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Estos coeficientes incorporan σ (método de *conductividad dividida*) y reducen a la forma sin pérdidas cuando $\sigma = 0$ [25, 75].

3.6.4. Discretización 2D para modo TE_z

En TE_z los campos no nulos son H_z, E_x, E_y . De forma análoga:

Actualización de E (en t^{n+1}) con σ :

$$E_x^{n+1}(i + \frac{1}{2}, j) = C_{ex} E_x^n(i + \frac{1}{2}, j) + \frac{\Delta t}{\epsilon(i + \frac{1}{2}, j)} \frac{1}{\Delta y} \frac{1}{1 + \frac{\sigma(i + \frac{1}{2}, j) \Delta t}{2\epsilon(i + \frac{1}{2}, j)}} \left[H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j - 1) \right] \tag{3.11}$$

$$E_y^{n+1}(i, j + \frac{1}{2}) = C_{ey} E_y^n(i, j + \frac{1}{2}) - \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j + \frac{1}{2})} \frac{1}{\Delta x} \frac{1}{1 + \frac{\sigma(i, j + \frac{1}{2}) \Delta t}{2\epsilon(i, j + \frac{1}{2})}} \left[H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i - 1, j + \frac{1}{2}) \right] \tag{3.12}$$

con

$$C_{ex} = \frac{1 - \frac{\sigma(i + \frac{1}{2}, j) \Delta t}{2\epsilon(i + \frac{1}{2}, j)}}{1 + \frac{\sigma(i + \frac{1}{2}, j) \Delta t}{2\epsilon(i + \frac{1}{2}, j)}}, \quad C_{ey} = \frac{1 - \frac{\sigma(i, j + \frac{1}{2}) \Delta t}{2\epsilon(i, j + \frac{1}{2})}}{1 + \frac{\sigma(i, j + \frac{1}{2}) \Delta t}{2\epsilon(i, j + \frac{1}{2})}}.$$

Actualización de H_z (en $t^{n+\frac{1}{2}}$):

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i, j) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i, j) + \frac{\Delta t}{\mu(i, j)} \left\{ \frac{E_x^n(i + \frac{1}{2}, j) - E_x^n(i - \frac{1}{2}, j)}{\Delta x} - \frac{E_y^n(i, j + \frac{1}{2}) - E_y^n(i, j - \frac{1}{2})}{\Delta y} \right\}. \tag{3.13}$$

3.6.5. Condición de estabilidad (Courant) en 2D

Para una rejilla cartesiana uniforme, el paso temporal debe satisfacer

$$\Delta t \leq S \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}}}, \quad 0 < S \leq 1,$$

con c la velocidad de la luz en el vacío. En la práctica se usa $S \simeq 0.9$ [25, 75].

3.6.6. Observaciones prácticas (malla de Yee)

- **Estenciles compactos:** los rizoides se calculan con *diferencias centrales* de primer orden en espacio y segundo orden en tiempo, minimizando errores de fase y manteniendo energía numérica consistente [24].
- **Interfaces y materiales:** ϵ, μ, σ se definen por celda; en interfaces se recomienda tratamiento de *promedios armónicos* para ϵ y μ vistos por cada componente.
- **PML:** las capas perfectamente adaptadas modifican σ (y, en variantes U-PML, introducen términos anisótropos/estiramientos) para absorber ondas salientes; su implementación mantiene el mismo patrón de actualización [25, 76].
- **Convergencia:** el refinamiento de $\Delta x, \Delta y$ y del espesor PML debe estabilizar λ_m y n_{eff} (criterios típicos: variación < 0.05 nm y $< 10^{-4}$, respectivamente).

3.6.7. Dominio 2D y condiciones de frontera

El dominio 2D incluye el núcleo, el revestimiento y una **capa líquida** que modela el medio externo (n_{ext}), con espesor de al menos uno a dos diámetros de cintura para capturar el campo evanescente sin interacción espuria con las fronteras. En el contorno se aplicaron **capas perfectamente adaptadas** (PML) en 2D (10–12 celdas) con gradiente polinómico de conductividad para minimizar reflexiones (< -50 dB en la banda). Las PML de Berenger y variantes uniaxiales son el estándar para absorber ondas salientes en FDTD [25, 76].

3.6.8. Malla y estabilidad

La malla cartesiana se refinó en la cintura (región de mayor interacción evanescente) con paso espacial

$$\Delta_{\text{mín}} \leq \frac{\lambda_0}{15 n_{\text{máx}}} \quad (\text{típico}) \quad \text{a} \quad \frac{\lambda_0}{20 n_{\text{máx}}} \quad (\text{exigente}),$$

y se empleó *coarsening* controlado lejos de la fibra para reducir el coste. El paso temporal cumplió el criterio de **Courant** en 2D [24, 25]:

$$\Delta t \leq S \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}}}, \quad S \simeq 0.9.$$

Se verificó convergencia de n_{eff} y de la posición de muesca frente a refinamientos de malla y espesor de PML.

3.6.9. Polarización y extracción modal

Se inyectó el modo fundamental mediante una *fente modal* y se registraron campos y fase en planos de muestreo. El $n_{\text{eff}}(\lambda)$ se obtuvo por *phase unwrapping* entre dos líneas separadas en el dominio 2D, de acuerdo con los procedimientos habituales en FDTD [25, 26]. Los valores de n_{eff} obtenidos para cada tramo (multi-slice) se utilizaron como insumo en la reconstrucción interferométrica, la cual reprodujo cuantitativamente el espectro experimental (muecas en el intervalo 1520–1600 nm con elevada relación de extinción, ER) reportada en [22].

3.7. Geometría y materiales

- **Fibra monomodo (SMF):** estructura guía basada en un núcleo de geometría cilíndrica con índice de refracción $n_{\text{core}} \approx 1.468$ a 1550 nm, rodeado por un revestimiento con índice de refracción $n_{\text{clad}} \approx 1.463$.¹
- **Tapers:** perfiles de estrechamiento lineal o exponencial equivalentes, con diámetros en

¹Valores de referencia; en las simulaciones se emplearon índices efectivos para concordar con la dispersión material del proveedor (tabla del fabricante).

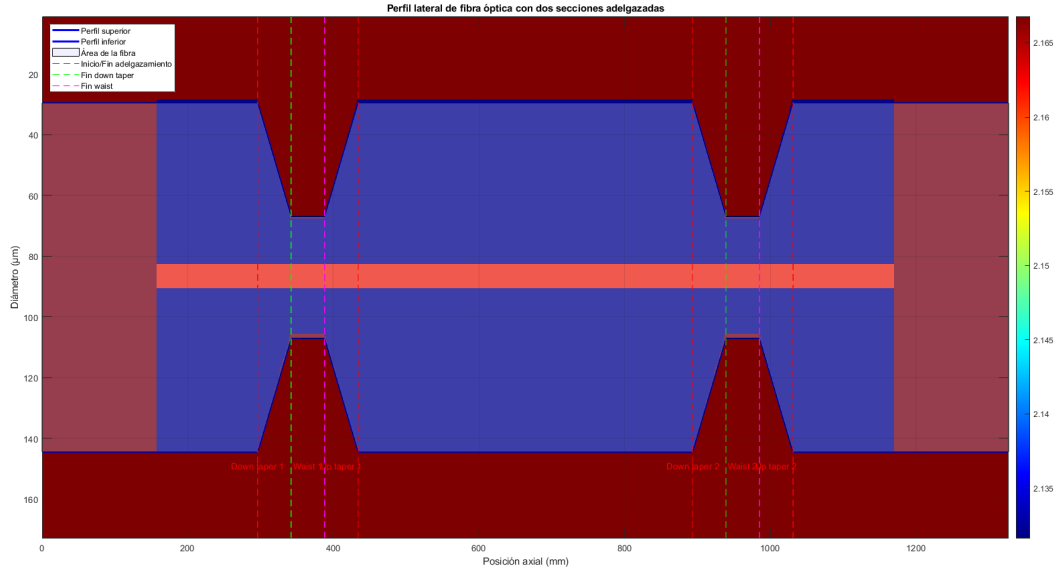


Figura 3.2: Construcción de la geometría del sensor mediante el método FDTD

el extremo denso (DT) y en el extremo delgado (UT) de 1 mm, y una región de cintura (WT) de $40 \mu\text{m}$.

- **Separación efectiva:** $L = 10 \text{ mm}$ (distancia entre las regiones de acoplamiento principal).
- **Medio externo:** fase acuosa o buffer (índice de refracción $n_{\text{ext}} \approx 1.333$), en la cual se inducen variaciones del índice de refracción Δn_{ext} (asociadas a cambios de pH o a la presencia de ARS) en el intervalo 10^{-4} – 10^{-3} .

Las características previamente descritas se representan en el método FDTD, tal como se muestra en la figura 3.2, en la cual se distinguen de manera explícita cada una de las regiones adelgazadas, el núcleo de la fibra y el medio circundante asociados al sensor propuesto.

3.8. Fuente modal y monitores

Se usa una **fente modal** inyectada en la fibra antes de la DT. La excitación es un *pulso gaussiano* en banda (1520–1600 nm) para permitir transformada de Fourier en el posproceso. Se instalan monitores a lo largo del eje y:

1. **Campo transversal** ($|E|, |H|$) en planos de corte (para inspección modal).
2. **Transmisión espectral** $T(\lambda)$ en la salida (después de UT).
3. **Fase modal**: Determinación del índice de refracción efectivo dependiente de la longitud de onda, $n_{\text{eff}}(\lambda)$, aplicadas a dos planos de medida separados una distancia Δz en el tramo rectilíneo de la estructura.

$$n_{\text{eff}}(\lambda) = \frac{\lambda}{2\pi \Delta z} \Delta\phi(\lambda).$$

3.9. Reconstrucción interferométrica (modelo híbrido)

El MZI puede verse como dos divisores/acopladores modales (DT y UT) separados por una línea de transmisión óptica de longitud efectiva L . Sea a el modo cuasi-núcleo y b un modo de cubierta dominante. La transmisión normalizada se aproxima por

$$T(\lambda) = \eta_a(\lambda) + \eta_b(\lambda) + 2\sqrt{\eta_a(\lambda)\eta_b(\lambda)} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta n_{\text{eff}}(\lambda)L + \varphi_0(\lambda)\right), \quad (3.14)$$

donde $\eta_{a,b}$ encapsulan el reparto de potencia y pérdidas (obtenibles por FDTD local en DT/UT) y φ_0 recoge fases de acoplo. El término de fase gobierna las **muestras**:

$$\lambda_m \simeq \frac{\Delta n_{\text{eff}}(\lambda_m) L}{m}, \quad \Delta\lambda_m \approx \frac{L}{m} \frac{\partial \Delta n_{\text{eff}}}{\partial n_{\text{ext}}} \Delta n_{\text{ext}}.$$

3.10. Plan de simulación

El plan de simulación se diseñó para capturar, con el mínimo costo numérico posible, los mecanismos ópticos que determinan la firma interferométrica del sensor Mach-Zehnder (MZI) en fibra *tapered*. En primer lugar, se adoptó un esquema **FDTD 2D** sobre la sección transversal para estimar con precisión los índices efectivos $n_{\text{eff}}(\lambda)$ de las contribuciones dominantes (modo cuasi-núcleo y modo de cubierta) a lo largo de la banda 1520–1600 nm. Con ello se evita el enorme costo de un dominio 3D completo (dos *tapers* y el tramo intermedio), sin sacrificar la fidelidad del parámetro que verdaderamente gobierna la fase interferométrica: la diferencia

$\Delta n_{\text{eff}}(\lambda)$ que aparece en la condición de muestas y en la expresión de transmisión (*cf.* Ver capítulo 5 y (3.14)). La variación axial inducida por la geometría cónica se incorpora mediante un *ensamble*: la región *DT-waist-UT* se discretiza en segmentos z_k cuasi-constantés en radio; para cada segmento se resuelve el problema 2D, se extrae $n_{\text{eff}}^{(a)}(\lambda; z_k)$ y $n_{\text{eff}}^{(b)}(\lambda; z_k)$, y la *fase acumulada* se obtiene por integración a lo largo de la longitud efectiva L ,

$$\Delta\phi(\lambda) = \frac{2\pi}{\lambda} \sum_k \Delta n_{\text{eff}}(\lambda; z_k) \Delta z_k, \quad \Delta n_{\text{eff}} \equiv n_{\text{eff}}^{(a)} - n_{\text{eff}}^{(b)}.$$

Este flujo 2D es estándar para guías lentamente variantes y está sólidamente documentado en la literatura FDTD [24–26, 75].

Cada simulación 2D emplea una **mallá de Yee** con refinamiento local en la cintura para capturar el campo evanescente y evitar dispersión numérica en la vecindad de los contornos dieléctricos. El paso espacial mínimo se selecciona entre $\lambda/(15 n_{\text{máx}})$ y $\lambda/(20 n_{\text{máx}})$, mientras que el paso temporal satisface el criterio de Courant en 2D con un factor de seguridad $S \simeq 0.9$. Las fronteras externas del dominio se cierran con capas perfectamente adaptadas (PML) de Berenger con *grading* polinómico, de modo que las reflexiones residuales permanezcan por debajo de -50 dB en la banda [25, 76]. La excitación es un pulso ancho en frecuencia (tipo gaussiano) inyectado con *soft source*; la energía se deja decaer hasta un residual inferior a -60 dB antes de realizar las transformadas temporales.

La **extracción modal** se hace de forma no ambigua registrando el campo complejo en dos líneas transversales separadas una distancia Δz dentro del mismo segmento axial y aplicando un *phase unwrapping* sobre la fase del modo seleccionado. A partir de la diferencia de fase $\Delta\varphi(\lambda)$ se calcula $n_{\text{eff}}(\lambda) = \lambda \Delta\varphi(\lambda)/(2\pi \Delta z)$. Al repetir este procedimiento para el modo de cubierta dominante, se obtiene $\Delta n_{\text{eff}}(\lambda)$ con la resolución espectral deseada. Para mitigar ondulaciones numéricas, las curvas $n_{\text{eff}}(\lambda)$ se suavizan con un filtro polinómico local suave, cuidando de no distorsionar la pendiente espectral en el entorno de interés (1550–1565 nm).

Una vez conocida la fase acumulada, la **transmisión interferométrica** se reconstruye con el modelo de dos contribuciones (Ecuación (3.14)), usando funciones $\eta_a(\lambda)$ y $\eta_b(\lambda)$ que se calibran a partir de pérdidas por transición y reparto de potencia estimados localmente por

FDTD en las zonas *DT* y *UT*. Este acoplamiento híbrido (FDTD para n_{eff} y coeficientes, modelo analítico para la interferencia) permite recuperar con alta fidelidad la posición de las muescas, su separación (*FSR*) y su profundidad (*ER*) sin simular explícitamente el conjunto 3D. Finalmente, para estudiar sensibilidad y robustez se programan tres *familias de barridos*: (i) la longitud efectiva L en el rango 6–14 mm, con énfasis en el compromiso sensibilidad–FSR; (ii) el diámetro de cintura entre 30 y 60 μm , para evaluar el aumento del campo evanescente frente a pérdidas por dispersión; y (iii) el índice del medio externo n_{ext} en pasos de 10^{-4} , que emulan variaciones de pH y concentración de ARS. En todos los casos se verifica convergencia por refinamiento de malla y de PML, y se realiza una comparación directa con la firma experimental en aire y en solución para afinar parámetros materiales dentro de las tolerancias del fabricante [22, 23].

3.11. Métricas extraídas

Desde ek punto de vista numérico, la simulación proporciona dos objetos primarios: las curvas $n_{\text{eff}}^{(a)}(\lambda)$ y $n_{\text{eff}}^{(b)}(\lambda)$ por segmento axial, y la transmisión reconstruida $T(\lambda)$ del conjunto. A partir de $T(\lambda)$ se identifican las **muescas** por mínimo local y se obtiene su longitud de onda λ_m con ajuste parabólico/gaussiano para alcanzar la resolución. La **relación de extinción** (ER) se cuantifica como $10 \log_{10}(P_{\text{máx}}/P_{\text{mín}})$ en el entorno inmediato de la muesca; el **ancho a media altura** (FWHM) se determina a -3 dB respecto del nivel local y, con ello, el **factor de calidad** $Q = \lambda_m/\text{FWHM}$. El **espaciado espectral libre** (*FSR*) se calcula entre muescas consecutivas y se contrasta con la predicción $\text{FSR} \approx \lambda^2/(\Delta n_{\text{eff}} L)$, lo que ofrece una verificación cruzada de coherencia interna entre el bloque FDTD y la reconstrucción interferométrica.

Para la **sensibilidad a índice** se generan familias $T(\lambda | n_{\text{ext}})$ y, en cada caso, se sigue la muesca más limpia (alrededor de 1558–1561 nm) a lo largo de la banda. La derivada $S_{\text{RI}} = \partial \lambda_m / \partial n_{\text{ext}}$ se estima por regresión lineal en ventanas estrechas de n_{ext} (pasos de 10^{-4}) donde la relación es prácticamente lineal; esta magnitud, combinada con la relación $n_{\text{ext}}(\text{pH})$ en agua y *buffers* (o con una curva empírica λ_m vs. pH), conduce a la sensibilidad S_{pH} . En presencia de ARS, las simulaciones permiten anticipar tendencias de corrimiento ante variaciones de n_{ext} pequeñas asociadas a cambios de concentración y, con ello, facilitar la interpretación de los

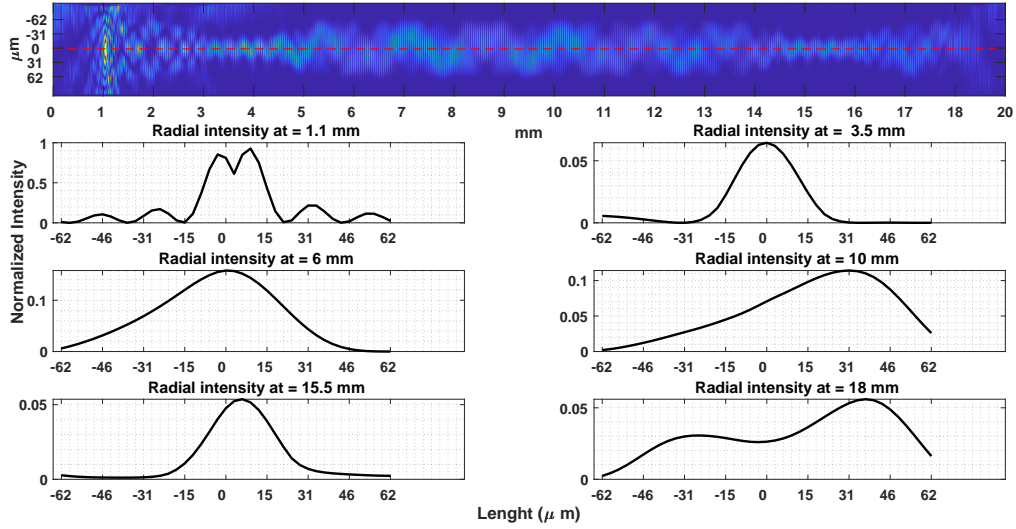


Figura 3.3: Simulación del campo electromagnético incidente E.

datos experimentales de cinética e isothermas.

La **validación** se lleva a cabo en dos niveles. En primer término, se comparan las muescas simuladas en aire con la firma de referencia (tres valles bien definidos en 1520–1600 nm, con ER elevada), ajustando finamente n_{core} y n_{clad} dentro de sus tolerancias para minimizar el error relativo $\varepsilon_m = |\lambda_m^{\text{sim}} - \lambda_m^{\text{exp}}|/\lambda_m^{\text{exp}}$. En segundo término, se contrasta el *FSR* y la forma espectral mediante una correlación cruzada normalizada entre $T_{\text{sim}}(\lambda)$ y $T_{\text{exp}}(\lambda)$ una vez normalizados y alineados, lo que da una medida robusta de coincidencia de fase y visibilidad.

3.12. Validación con el experimento

La curva simulada de transmisión espectral, $T(\lambda)$, presenta una concordancia notable con la **firma espectral en aire**, caracterizada por la presencia de tres muescas en el intervalo 1520–1600 nm y una elevada relación de extinción (ER) como se observa en la figura 3.4. Asimismo, en la región 1558–1561 nm reproduce fielmente el corrimiento espectral observado

al modificar el índice de refracción del entorno. Sobre esta base, se define un error relativo asociado a cada muesca:

$$\varepsilon_m = \frac{|\lambda_m^{\text{sim}} - \lambda_m^{\text{exp}}|}{\lambda_m^{\text{exp}}},$$

y una métrica de forma vía correlación cruzada entre $T_{\text{sim}}(\lambda)$ y $T_{\text{exp}}(\lambda)$ tras normalización. Se ajustan n_{core} , n_{clad} para minimizar $\sum_m \varepsilon_m$.

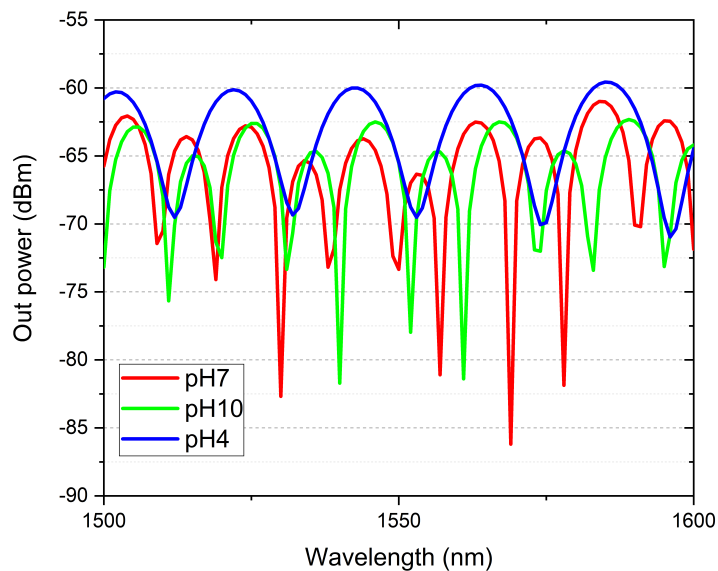


Figura 3.4: Respuesta espectral mediante el método FDTD para cada longitud de onda

3.13. Análisis de sensibilidad

3.13.1. Separación efectiva L

Incrementar L reduce el FSR y aumenta la sensibilidad de fase (Ecs. 3.14 y 2.14); L excesivo puede acercar muescas y complicar el rastreo.

3.13.2. Cintura (WT)

Reducir la cintura incrementa el campo evanescente (mayor $\partial\Delta n_{\text{eff}}/\partial n_{\text{ext}}$) y profundiza muescas (ER), pero eleva pérdidas y sensibilidad a microcurvatura.

3.13.3. Índice externo n_{ext}

Pequeñas variaciones en el intervalo (10^{-4} – 10^{-3}) inducen desplazamientos de λ_m que se comportan de manera aproximadamente lineal dentro de bandas espectrales estrechas. Este comportamiento constituye la base para la calibración del sistema pH/ARS.

3.14. Limitaciones del modelo

El esquema 2D–FDTD empleado asume variación axial lenta y acoplos adiabáticos, por lo que no captura completamente conversiones multimodales, retro–reflexiones entre segmentos ni efectos 3D (desalineaciones, excentricidad de núcleo o curvaturas locales); además, se supone medio lineal, isótropo y sin dispersión explícita (sílice con parámetros efectivos), de modo que la termo–óptica, la dispersión material (p. ej., leyes de Sellmeier) y las pérdidas por absorción/dispersión se ignoran. El recubrimiento superficial (MWCNT/Fe) se modela como capa efectiva homogénea, sin rugosidad ni anisotropía, y sin resonancias plasmónicas; por ello, la interacción real campo–superficie podría subestimarse o desplazarse espectralmente. La extracción de $n_{\text{eff}}(\lambda)$ por entre planos separados Δz es sensible al ruido de fase y a la dispersión de rejilla; asimismo, el escalonado en interfaces curvilíneas y la dispersión numérica pueden introducir sesgos de centésimas de nanómetro en λ_m si la malla no es suficientemente fina. La PML atenúa las ondas salientes, pero no es perfectamente libre de reflexión, por lo que errores de cierre de dominio (espesor y *grading*) pueden contaminar el campo temporal si no se verifica energía residual < -60 dB. Finalmente, el acoplamiento con el modelo interferométrico de dos contribuciones presupone visibilidad estable y reparto modal suave en DT/UT; en presencia de asimetrías geométricas, las métricas derivadas (FSR, ER, Q y S_{RI}) pueden desviarse respecto del experimento y requieren ajuste fino de índices y pérdidas dentro de tolerancias del

fabricante [24, 25, 75, 76].

3.15. Pseudocódigo del flujo FDTD

1. **Definir geometría:** DT/UT=1 mm, WT=40 μm , $L = 10$ mm; capas de líquido (n_{ext}).
2. **Malla y PML:** $\Delta_{\text{mín}} = \lambda/(15n_{\text{máx}})$ en cintura; PML 10–12 celdas.
3. **Fuente modal:** Pulso de banda 1520–1600 nm.
4. **Correr FDTD** hasta residual < -60 dB.
5. **Monitores:** campos transversales, transmisión espectral, fase en dos planos.
6. **Postproceso:** FFT $\rightarrow T(\lambda)$; fase $\rightarrow n_{\text{eff}}(\lambda)$; reconstrucción $T(\lambda)$ con Eq. (3.14).
7. **Validación:** ajuste de índices dentro de tolerancias; comparación de λ_m y ER.

3.16. Resumen

Se desarrolló un *esquema computacional* FDTD robusto para el análisis del interferómetro Mach–Zehnder (MZI) en fibra *tapered*, integrando de forma coherente el cálculo de n_{eff} , la estimación del acoplamiento modal y la posterior reconstrucción espectral. El modelo reproduce el mismo patrón interferométrico observado y posibilita el análisis, del impacto de L , de la cintura y del índice externo sobre el corrimiento de las muescas y la sensibilidad, estableciendo así las bases para las comparaciones cuantitativas desarrolladas en los capítulos experimentales.

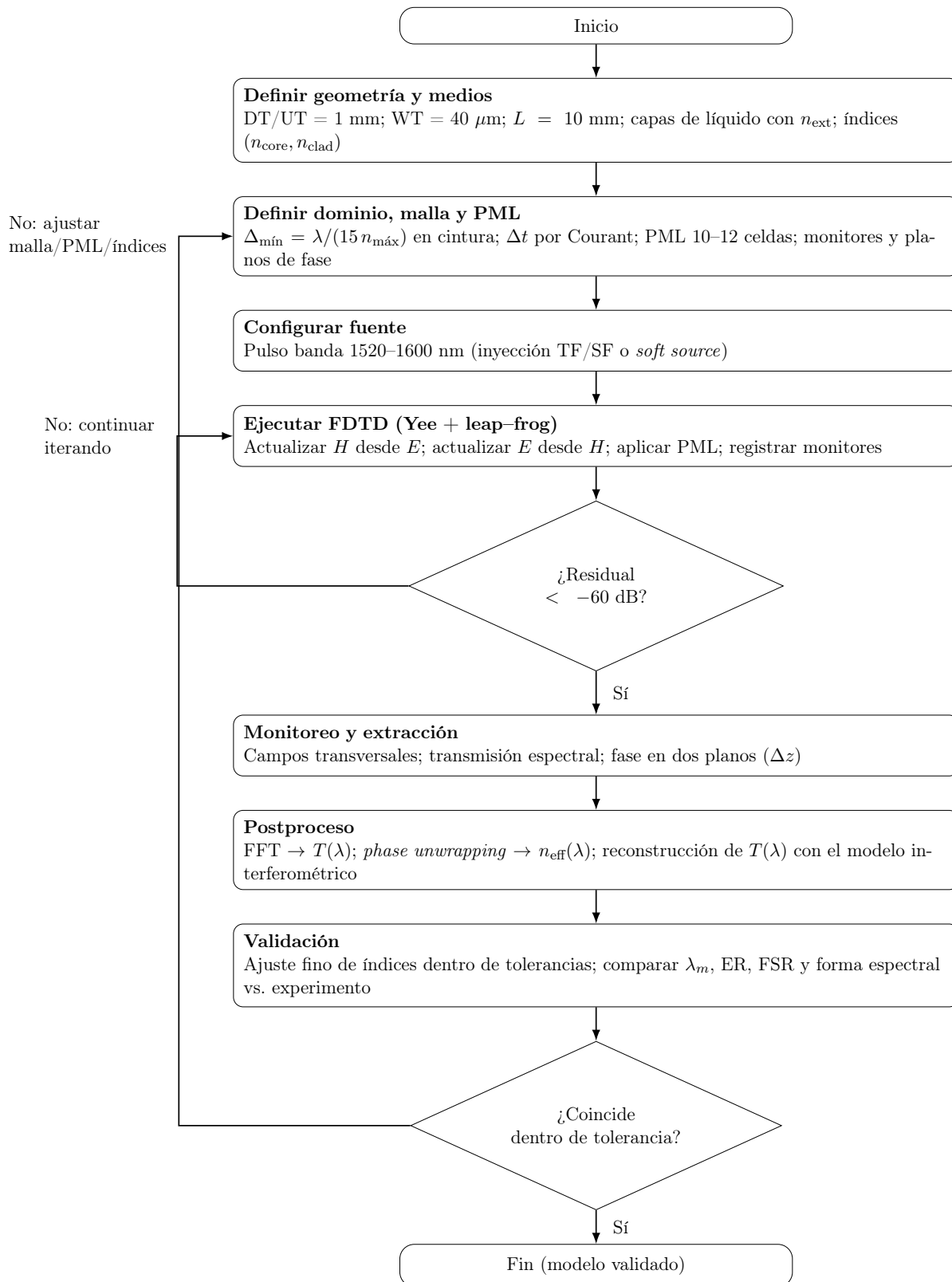


Figura 3.5: Diagrama de flujo del proceso FDTD aplicado al interferómetro MZI en fibra *adelgazada*, siguiendo el pseudocódigo de la sección 3.15.

Capítulo 4

Metodología

4.1. Diseño del sensor

El sensor desarrollado en esta tesis se basa en la estructura de un interferómetro Mach-Zehnder fabricado a partir de una fibra óptica monomodo SMF-28e de Corning. La geometría del sensor consta de dos regiones cónicas separadas aproximadamente 10 mm, cada una con secciones de transición de 1 mm y una cintura de 40 μm de diámetro. Esta configuración permite la generación de modos evanescentes que interactúan con el medio circundante.

4.2. Fabricación del sensor

El procesamiento de la fibra se realiza mediante un sistema automatizado de tracción y calentamiento (Vytran GPX-3400). Este dispositivo integra sistemas automáticos tanto de estiramiento como de calefacción, lo que garantiza un tratamiento consistente y reproducible de las fibras ópticas. El sistema automatizado de tracción posibilita un estiramiento homogéneo de la fibra, lo que preserva la integridad del material y reduce al mínimo la aparición de defectos durante el adelgazamiento. La regulación exacta de la temperatura permite un óptimo ablandamiento de la sílice, lo cual resulta esencial para alcanzar los perfiles de disminución requeridos [77, 78]; se emplearon los siguientes parámetros:

- Potencia inicial de calentamiento: ≈ 42 W
- Velocidad de tracción: ≈ 1 mm/s
- Tiempo de retardo: 1 ms
- Disminución de potencia del filamento: -10%

Estas condiciones facilitan la obtención de fibras que presentan adelgazamientos cónicos repetibles y pérdidas de inserción inferiores a ≈ 3 dB.

4.2.1. Fabricación del interferómetro de Mach–Zehnder en fibra *tapered*

La estructura interferométrica se implementó como dos regiones cónicas concatenadas que actúan, respectivamente, como divisor y recombinador modal. La transición descendente *down taper* (DT) acopla parte del modo de núcleo hacia modos de cubierta; la cintura (*waist*) intensifica la interacción evanescente con el entorno; y la transición ascendente *up-taper* (UT) recombina los caminos ópticos. Se buscó una geometría reproducible con DT y UT de aproximadamente 1 mm de longitud cada una, una cintura cercana a $40\ \mu\text{m}$ de diámetro y una separación efectiva entre zonas de acoplo $L \approx 10$ mm como se observa en la figura 4.1. A lo largo de la fabricación, se vigiló la simetría de las transiciones y la uniformidad de la cintura, ya que ambas condicionan la visibilidad interferométrica y la relación de extinción (ER) en el espectro. La pieza terminada se montó en un soporte rígido que evitara microcurvaturas y tensión axial durante las mediciones.

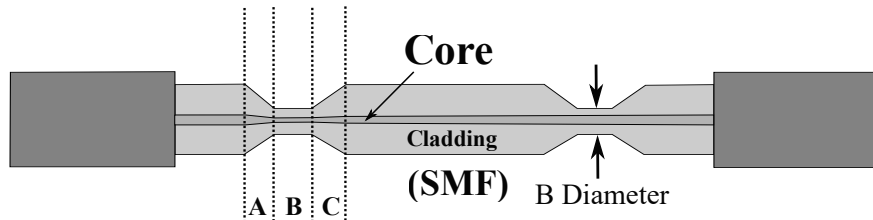


Figura 4.1: Estructura del sensor de fibra óptica

4.3. Funcionalización de la fibra con MWCNT

Se emplearon nanotubos de carbono de paredes múltiples que han sido funcionalizados, un proceso esencial que incrementa de manera significativa su compatibilidad con diversos materiales, así como su efectividad en aplicaciones tales como sensores, materiales compuestos y catálisis. Los distintos métodos de funcionalización son capaces de incorporar una variedad de grupos funcionales, lo que mejora la dispersión y la reactividad de los MWCNT, y, por consiguiente, optimiza su rendimiento en diversas aplicaciones. Se utilizaron MWCNT funcionalizados de tres maneras:

1. **MWCNT-OH: (funcionalización de hidroxilo):** Este método implica el tratamiento de los MWCNT con peróxido de hidrógeno (H_2O_2) a temperaturas elevadas. El proceso de oxidación genera la introducción de grupos hidroxilo (-OH) en la superficie de los nanotubos, lo cual puede mejorar su solubilidad en agua y facilitar su interacción con otros materiales. Los MWCNT funcionalizados con grupos hidroxilo han demostrado una dispersión mejorada en diversos solventes y matrices poliméricas, lo cual resulta fundamental para su aplicación en materiales compuestos y sensores. [79,80]. Este tratamiento de funcionalización para los grupos H_2O_2 a 100 °C fue realizado por 1 hora.
2. **MWCNT-COOH: (funcionalización de carboxilo)** Los MWCNT pueden ser sometidos a un tratamiento con ácido nítrico (HNO_3) para generar grupos carboxilo (-COOH). Este procedimiento aumenta significativamente la hidrofiliidad de los MWCNT, facilitando una adhesión más eficaz a polímeros y otros materiales. Los MWCNT funcionalizados con carboxilo se han estudiado ampliamente para sus aplicaciones en sistemas de administración de fármacos y como agentes de refuerzo en materiales compuestos debido a su compatibilidad mejorada con compuestos y resinas biológicas [81,82]. Este procedimiento también fue realizado a 120 °C por 1 hora.
3. **MWCNT-Fe: (funcionalización de hierro)** Esto requiere la aplicación de cloruro de hierro(II) (FeCl_2) y cloruro de hierro(III) (FeCl_3) en MWCNT, seguida por una reducción utilizando hidracina (N_2H_4). Los MWCNT obtenidos, tras ser funcionalizados con hierro,

pueden actuar como catalizadores eficientes o como componentes en nanocompuestos magnéticos [83]. La presencia de hierro no solo optimiza las propiedades electromagnéticas, sino que también facilita su aplicación en los procesos de separación [84].

La funcionalización de la región de cintura se llevó a cabo por deposición húmeda con dispersión estable de MWCNT. Para cada variante (COOH, OH y Fe), se preparó una suspensión acuosa o hidroalcohólica a baja concentración, que se sonicó hasta obtener un estado homogéneo. La fibra *tapered* se sumergió parcialmente o se sometió a un *drop-casting* controlado en la cintura, con tiempos de contacto cortos para evitar recubrimientos excesivamente densos que incrementen pérdidas por dispersión. Tras la deposición, la muestra se secó en ambiente limpio y se estabilizó a temperatura moderada. Con ello se formó una capa funcional que mejora la interacción del campo evanescente con el medio y, en el caso de MWCNT-Fe, provee sitios activos que favorecen la adsorción de ARS.

4.4. Preparación de soluciones

Se prepararon soluciones acuosas con Alizarin Red S (ARS) a 0.1 g/L en soluciones buffer estandarizadas de 4.0, 7.0 y 10.0. El sensor fue expuesto a 10 mL de cada solución durante intervalos de tiempo controlados, en un período de 60 minutos. Esta concentración fue seleccionada considerando estudios previos que demostraron una respuesta espectral apreciable sin saturar los sitios activos en la superficie funcionalizada.

A continuación, se añadió la cantidad adecuada de ARS, garantizando una disolución homogénea a través de agitación magnética durante un período de 10 minutos. Las soluciones fueron resguardadas en recipientes de vidrio opaco con el propósito de prevenir la degradación fotoquímica del colorante.

En cada experimento, la fibra sensora recubierta con MWCNT fue sumergida directamente en las soluciones durante periodos regulados que oscilaron entre 5 minutos y 2 horas, mientras se mantenía la temperatura ambiente a 30 °C . Este método aseguró condiciones constantes y reproducibles en todos los experimentos.

Previo a cada nueva inmersión, el sensor se lavó utilizando alcohol isopropílico y agua desionizada, con el fin de remover residuos de muestras previas y prevenir contaminaciones cruzadas.

4.5. Configuración experimental

El sistema de adquisición empleado para la caracterización de los sensores consistió en una fuente de luz operando en un rango espectral de 1400 a 1600 nm, la cual se conectó directamente al sensor a través de conectores de fibra de tipo FC/APC. Esta fuente facilitó la iluminación de la región cónica funcionalizada con nanotubos, produciendo patrones de interferencia modales característicos.

La señal transmitida fue analizada mediante un analizador de espectro óptico modelo Anritsu MS9740A, el cual posee una resolución espectral de hasta 1 nm y sensibilidad de detección en la escala de -70 dBm.

Se limitaron los cambios bruscos de temperatura ambiente ($\pm 1-2^\circ\text{C}$ en ventanas cortas) y, cuando fue necesario, se permitió un periodo de estabilización previa antes de iniciar la adquisición. Asimismo, se implementó una plataforma antivibratoria para mitigar el efecto de ruidos mecánicos o movimientos no intencionados durante las pruebas.

El sensor fue firmemente fijado utilizando abrazaderas en ubicaciones específicas a lo largo de la cubierta de la fibra, con excepción de la región funcionalizada, la cual se dejó libre. Cada registro se llevó a cabo a intervalos constantes de 600 segundos, con una duración total de cada experimento de 3000 segundos. Al finalizar cada medición, el sensor fue retirado cuidadosamente, sometido a un proceso de limpieza con alcohol isopropílico y agua desionizada, y preparado para su subsecuente inmersión en una nueva solución de prueba.

4.6. Simulación computacional (FDTD)

Para complementar los experimentos, se aplicó el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) con el objetivo de simular la propagación del campo electromagnético

en el sensor de fibra óptica. La estructura considerada en el estudio incluyó dos secciones concatenadas con transiciones suaves de 1 mm y una cintura central de 40 μm de diámetro. La longitud total del dominio simulado fue de 18 mm, con 2 mm adicionales para la entrada y salida de la señal.

Las propiedades ópticas especificadas en el modelo comprendían un *core* con índice de refracción valorado en 1.47 y un *cladding* con un valor de 1.46. El entorno externo fue representado mediante una capa envolvente, caracterizada por índices de refracción, cuyos valores oscilaban entre 1.333 y 1.502, en correspondencia con las soluciones de pH aplicadas en los experimentos. La fuente de excitación empleada consistió en una onda senoidal modulada, centrada en el rango espectral de 1400 a 1600 nm, equivalente a la utilizada en las mediciones experimentales.

Se aplicaron condiciones de frontera absorbentes (PML) con el propósito de mitigar las reflexiones indeseadas en los límites del dominio según simulación. La malla descrita en discretización fue configurada con un intervalo espacial de 0.05 μm , lo que aseguró una resolución adecuada de las características geométricas de la fibra.

En el transcurso de la simulación, se resolvieron las componentes del campo eléctrico E_z , así como del campo magnético asociado, lo cual permitió la observación de la generación de los modos guiados y su interacción a lo largo de la cintura del sensor. Los resultados indicaron que alteraciones en el índice de refracción del entorno externo provocan una variación en la interferencia modal, manifestada como desplazamientos espectrales (notches) en la respuesta del espectro. Estos desplazamientos fueron verificados con los resultados experimentales, lo que permitió corroborar tanto el comportamiento del sensor como la validez del modelo computacional propuesto.

4.7. Parámetros de análisis

Para realizar una evaluación cuantitativa del desempeño de los sensores desarrollados, se estableció una serie de parámetros de análisis fundamentados en la respuesta espectral obtenida durante los experimentos. Uno de los indicadores más importantes fue el desplazamiento de las mínimas espectrales o notches, las cuales representan la interferencia modal resultante de la

variación en la *trayectoria* óptica efectiva entre el modo guiado en el núcleo y el modo acoplado al revestimiento. El desplazamiento espectral, expresado en nanómetros por unidad de pH (nm/pH), se utilizó como una medida directa de la sensibilidad del sensor.

Adicionalmente, se analizó la variación en la potencia de transmisión medida en unidades de dBm. Estas variaciones reflejan la atenuación de la señal como resultado de la interacción entre el campo evanescente y el medio externo, influenciada por la presencia del colorante ARS y su adsorción sobre la superficie funcionalizada del sensor. La correlación entre el pH y dBm proporcionó una segunda métrica para evaluar la respuesta óptica del sistema.

La estabilidad temporal de la respuesta también fue considerada. Se realizaron mediciones repetidas a lo largo de 3000 segundos, evaluando la deriva espectral de las mínimas y la fluctuación en la potencia de salida. Una respuesta constante durante el tiempo de exposición se consideró indicativa de una buena estabilidad operativa del sensor.

Otro aspecto significativo fue la repetibilidad. Con este objetivo, se llevaron a cabo ensayos en diferentes días, manteniendo constantes las condiciones de pH, temperatura y concentración de ARS. Se compararon los espectros obtenidos, tanto en posición de las longitudes de onda mínimas como en el nivel de potencia.

La combinación de dichos parámetros caracteriza de manera integral el comportamiento de los sensores, considerando tanto la perspectiva espectral como la robustez experimental, lo cual sirve como fundamento para su comparación con otras tecnologías de detección de contaminantes en medios acuosos.

4.8. Resumen

La metodología desarrollada combina la fabricación precisa de sensores interferométricos cónicos, su funcionalización con nanotubos de carbono modificados, y la evaluación experimental y computacional de su respuesta ante contaminantes en soluciones acuosas, particularmente el colorante ARS en diferentes niveles de pH. Finalmente, se describió el enfoque numérico complementario basado en FDTD para analizar la interacción campo-medio en la geometría considerada y apoyar la interpretación de los cambios espectrales observados. Con ello, se

establecieron las métricas de análisis (corrimiento de λ_m , variación de potencia/ER y parámetros derivados) que se utilizarán para cuantificar el desempeño del sensor.

En el Capítulo 5 se presentan los resultados experimentales y su análisis, incluyendo la respuesta del dispositivo ante cambios de pH y la interacción con ARS, así como la comparación entre funcionalizaciones y la evaluación de estabilidad y repetibilidad.

Capítulo 5

Resultados Experimentales

5.1. Resultados experimentales I

5.1.1. Objetivo

En esta sección se presentan los resultados experimentales de detección de pH y los ensayos de estabilidad a corto plazo de un sensor interferométrico tipo MZI implementado en fibra óptica monomodo con dos secciones cónicas concatenadas. Se evalúa la respuesta espectral bajo tres condiciones representativas (pH 4, 7 y 10) y se cuantifica la estabilidad de la potencia óptica junto con el desplazamiento de la longitud de onda en intervalos de 50 minutos; adicionalmente, se discute la robustez térmica dentro del rango de operación.

5.1.2. Configuración experimental

El sensor está constituido por dos *tapers* separados $L = 10$ mm, con zonas de transición *down-taper* (DT) y *up-taper* (UT) de 1 mm cada una y una cintura (WT) de diámetro $40 \mu\text{m}$ como se observa en la figura 4.1. La fibra empleada es SMF-28e. La interrogación espectral se realizó con una fuente del OSA en el rango 1520–1600 nm, para realzar la interacción evanescente con el medio, el sensor trabaja alrededor de 1559 nm.

Las muestras se prepararon con buffers patrón de pH 4 (ácido), 7 (neutro) y 10 (básico). La celda de ensayo se cargó con el volumen requerido y el sensor se fijó a ambos extremos para

mitigar microtensiones como se muestra en la figura 5.1. Entre mediciones se enjuagó la fibra con agua desionizada.

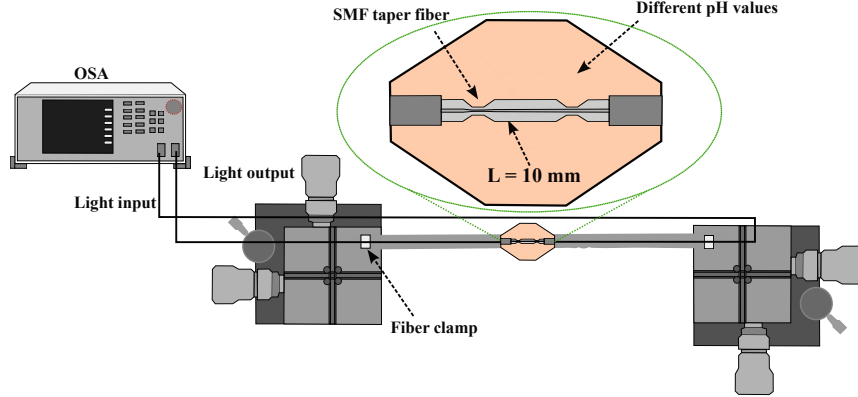


Figura 5.1: Configuración experimental

5.1.3. Modelo de operación

El MZI opera por interferencia entre un modo que recorre el núcleo y otro que recorre el revestimiento. La diferencia de camino óptico (OPD) viene dada por $OPD = \Delta n_{eff} L$ y la diferencia de fase por:

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta n_{eff} L, \quad (5.1)$$

donde L es la región efectiva de interacción y $\Delta n_{eff} = n_{eff}^{core} - n_{eff}^{clad}$. Las posiciones de mínima transmisión (“muescas”) satisfacen

$$\lambda_m = \frac{\Delta n_{eff} L}{m}, \quad (5.2)$$

con $m \in \mathbb{Z}^+$. Cambios de pH modifican el índice refractivo del entorno (Δn), alterando Δn_{eff} y desplazando λ_m :

$$\Delta\lambda_m \approx \frac{(\Delta n_{eff} + \Delta n) L}{m} - \frac{\Delta n_{eff} L}{m}. \quad (5.3)$$

5.1.4. Respuesta espectral de referencia (sin medio externo)

En aire (sin inmersión), el espectro de transmisión presenta tres muescas bien definidas dentro de 1520–1600 nm, con un *extinction ratio* (ER) de 16.7 dB. Las muescas se localizan en

$\lambda \approx 1537.6$ nm, 1561.5 nm y 1583.62 nm vease la figura 5.2. Este espectro actúa como *línea base* para la evaluación de desplazamientos inducidos por variaciones en el pH.

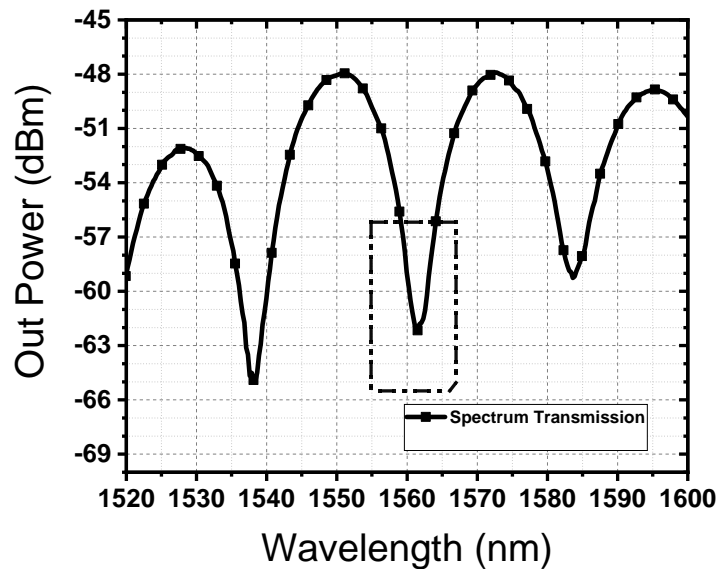


Figura 5.2: Espectro baseline para la evaluación de desplazamientos inducidos por variaciones en el pH.

5.1.5. Detección de pH (pH 4, 7 y 10)

La detección se realizó en sesiones temporales de 3000 s, compuestas por cinco interrogaciones de 600 s cada una, condicionadas por el pH. El parámetro de evaluación principal fue el desplazamiento de la muesca seleccionada en torno a 1559 nm, por ser la más sensible en la geometría propuesta esta se observa en la figura 5.3.

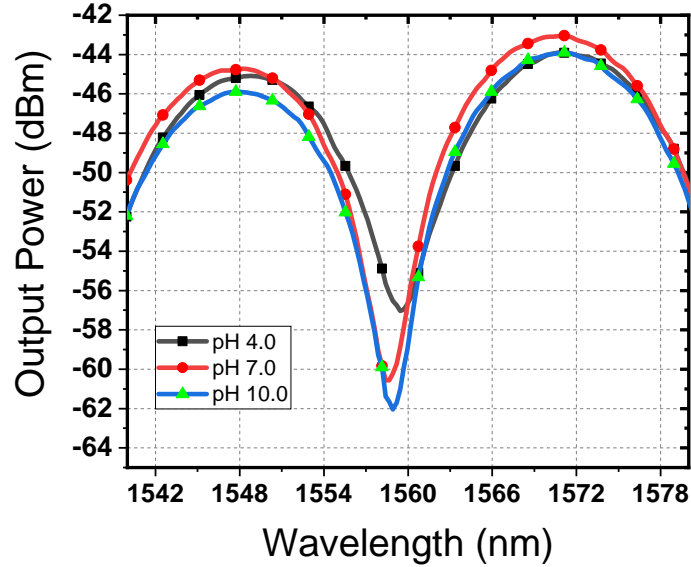


Figura 5.3: Espectro de detección de cada pH4, pH7 y pH10 para la evaluación de desplazamientos inducidos por variaciones de pH.

A nivel cualitativo, el espectro presenta desplazamientos detectables y consistentes entre pH 4, 7 y 10, concordantes con el aumento/disminución del índice refractivo efectivo de la región evanescente por el estado de protonación/deprotonación del medio. Numéricamente, las simulaciones FDTD del dispositivo con $L = 10$ mm predicen desplazamientos de ~ 7.9 nm entre pares de condiciones (pH $4 \leftrightarrow 7$ y $7 \leftrightarrow 10$) para muescas vecinas, lo que respalda la estrategia de interrogación en el entorno de $1.55 \mu\text{m}$.

5.1.6. Estabilidad a corto plazo

Para evaluar la estabilidad a corto plazo (50 min, muestreo cada 10 min) se analizaron dos métricas: (i) fluctuación de potencia óptica en la muesca seleccionada y (ii) desplazamiento de longitud de onda de dicha muesca.

5.1.7. Fluctuación de potencia óptica

Durante 50 min, el rango de potencia en OSA se mantuvo acotado por:

- pH 4: ≤ -3.06 dBm,
- pH 7: ≤ -1.348 dBm,
- pH 10: ≤ -1.491 dBm.

Estas fluctuaciones muestran tendencias temporales diferenciadas: pendiente positiva para pH ácido, prácticamente nula para pH neutro y negativa para pH básico, coherentes con cambios sistemáticos en el acoplamiento modo–revestimiento y el índice del entorno como se observa en la figura 5.4 .

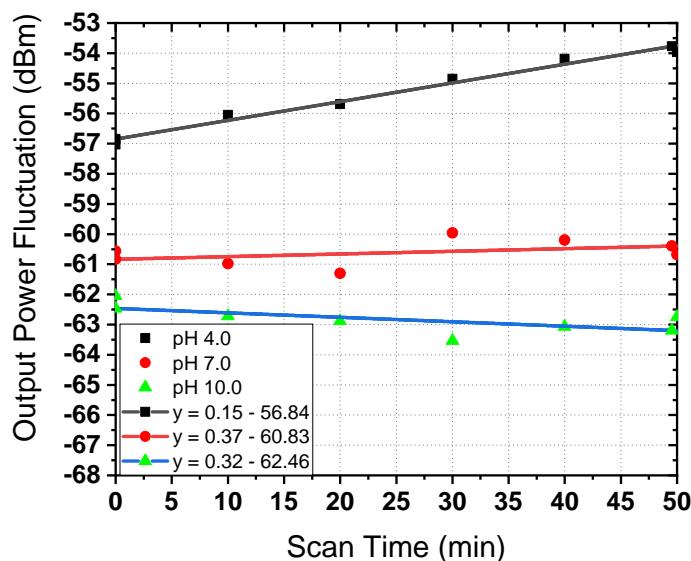


Figura 5.4: Desplazamiento de la potencia de salida de la respuesta del sensor cuando se sumerge en valores de pH de 4, 7 y 10 en un tiempo de 0 a 50 minutos.

5.1.8. Desplazamiento en la longitud de onda

La variación absoluta de la muesca en torno a 1559 nm, en la misma ventana de 50 min, se mantuvo por debajo de:

- pH 4: ≤ 0.52 nm,
- pH 7: ≤ 0.26 nm,
- pH 10: ≤ 0.26 nm.

Estas variaciones se deben a cambios externos en la disposición del sensor de fibra óptica. El comportamiento cuasi lineal de estas fluctuaciones permite observar un cambio constante

en el índice de refracción durante un período de 50 minutos como se observa en la figura 5.5. La resolución espectral del analizador fue de hasta 0.03 nm, suficiente para resolver los desplazamientos observados y su estabilidad relativa.

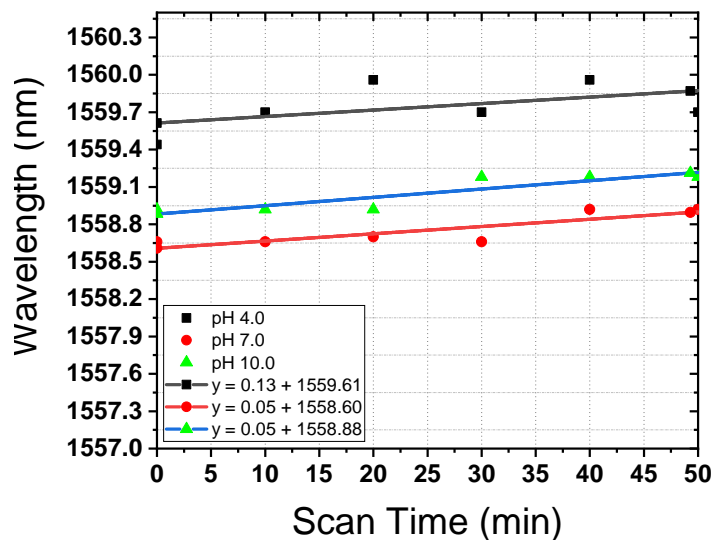


Figura 5.5: Desplazamiento de longitud de onda de la respuesta central del sensor en función del tiempo en un rango de 50 minutos.

La tabla 5.1 muestra la estabilidad de las fluctuaciones en potencia y el desplazamiento en longitud de onda del sensor propuesto.

Tabla 5.1: Resumen de estabilidad a corto plazo (50 min).

Condición	Fluct. potencia (máximo, dBm)	Desplazamiento λ (muesca ~ 1559 nm) (máximo, nm)
pH 4	≤ -3.06	≤ 0.52
pH 7	≤ -1.348	≤ 0.26
pH 10	≤ -1.491	≤ 0.26

Se verificó la invariancia del espectro dentro de un entorno térmico controlado de 25 °C a 32 °C, sin efectos adversos en la transmisión ni en la estabilidad de las muescas en el intervalo de prueba. Este comportamiento habilita la operación continua del sensor en aplicaciones de monitoreo con control térmico sencillo.

Los resultados confirman que: (i) la arquitectura MZI con doble *taper* y cintura de 40 μm pro-

vee una firma interferométrica con ER elevado (16.7 dB) y muescas bien definidas en 1.52–1.60 μm ; (ii) la interrogación cerca de 1559 nm maximiza la sensibilidad práctica a cambios de pH; (iii) la estabilidad temporal es adecuada para monitoreo continuo a escala de decenas de minutos, con variaciones subnanométricas en pH neutro y básico y medio nanómetro en ácido; y (iv) la robustez térmica en 25–32 °C simplifica la operación en campo.

Cabe notar que la respuesta observada está influida por el entorno químico de la celda (adsorción del colorante y funcionalización a base de nanotubos), que modifica el índice efectivo local y, por ende, el acoplamiento modal. Este aspecto se explora en mayor detalle en el Capítulo 6, dedicado a *adsorción y selectividad*.

El sensor MZI propuesto distingue de forma clara tres estados de pH (4, 7 y 10) mediante desplazamientos espectrales reproducibles alrededor de 1559 nm y mantiene una estabilidad de potencia y longitud de onda compatible con aplicaciones de vigilancia de calidad de agua. Estos resultados constituyen la base para estudios de sensibilidad fina (calibraciones multi-pH) y para la integración del dispositivo en plataformas de monitoreo *in situ*.

5.2. Resultados experimentales II

5.2.1. Objetivo y alcance

Esta sección evalúa la **remoción del colorante Alizarin Red S (ARS)** mediante *nanotubos de carbono de pared múltiple* (MWCNT) con distintas **funcionalizaciones** (grupos -COOH, -OH y MWCNT con hierro, MWCNT-Fe), y analiza cómo la interacción adsorbente-adsorbato modifica el **índice refractivo efectivo del entorno** y, por ende, **el espectro interferométrico** del sensor MZI desarrollado en la sección 5.1. Se caracterizan: (i) cinética de adsorción, (ii) isothermas de equilibrio (Langmuir y Freundlich), (iii) efecto del pH, (iv) eficiencia de remoción y (v) reusabilidad/regeneración del material, correlacionando estos hallazgos con desplazamientos espectrales y cambios en la profundidad de muescas del MZI.

5.2.2. Materiales adsorbentes y protocolos de funcionalización

Se emplearon tres adsorbentes basados en MWCNT:

1. **MWCNT–COOH**: Se realiza una oxidación ácida (p. ej., HNO_3 concentrado bajo reflujo) para introducir grupos carboxilo.
2. **MWCNT–OH**: Se realiza un tratamiento oxidante (p. ej., H_2O_2) para enriquecer grupos hidroxilo.
3. **MWCNT–Fe**: Se trata del anclaje de especies de hierro sobre la superficie (precipitación controlada/impregnación, seguido de secado/activación).

Tras lavado y secado, los polvos se dispersaron en agua desionizada por sonicación breve para favorecer una dosificación homogénea en los ensayos de adsorción.

5.2.3. Soluciones de ARS y condiciones

Las soluciones de ARS se prepararon a partir de un stock y se diluyeron hasta concentraciones objetivo C_0 en el rango de $10\text{--}200\text{ mg L}^{-1}$. Se evaluaron **pH 4, 7 y 10** mediante buffers estándar, con un volumen $V = 10\text{ mL}$, y de masa $m = 0.1\text{ g L}^{-1}$ del adsorbente; se realizó agitación moderada para cada muestra, a una temperatura $T \approx 25\text{ }^\circ\text{C}$ como se observa en la representación esquemática de la figura 5.6. Antes de cada corrida, se determinó la **longitud de onda de máxima absorción** de ARS mediante un barrido $350\text{--}700\text{ nm}$ y se definió $\lambda_{\text{máx}}$ para cuantificar C_t por espectrofotometría UV–Vis.

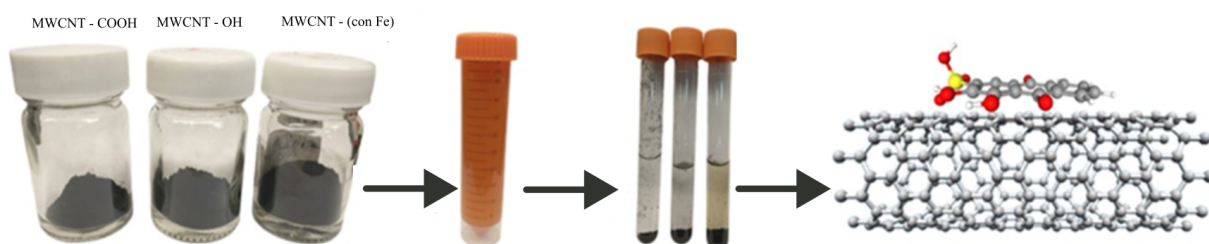


Figura 5.6: Representación esquemática del experimento donde se observan los diferentes adsorbentes: 1) MWCNT-OH; 2) MWCNT-Fe (con Fe nanoparticulas); 3) MWCNT-COOH.

Cálculo de remoción, carga y equilibrio

La fracción removida a tiempo t se estimó como

$$\% \text{Remoción}(t) = 100 \left(1 - \frac{C_t}{C_0} \right), \quad (5.4)$$

mientras que la carga adsorbida (mg g^{-1}) se calculó por balance de masa:

$$q_t = \frac{(C_0 - C_t)V}{m}, \quad q_e = \frac{(C_0 - C_e)V}{m}. \quad (5.5)$$

5.2.4. Modelado cinético

Se ajustaron los modelos de **pseudo-primer orden** (PFO, Lagergren) y **pseudo-segundo orden** (PSO):

$$\text{PFO: } \ln(q_e - q_t) = \ln q_e - k_1 t, \quad (5.6)$$

$$\text{PSO: } \frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{t}{q_e}, \quad (5.7)$$

donde k_1 (min^{-1}) y k_2 ($\text{g mg}^{-1} \text{min}^{-1}$) son las constantes cinéticas. En todas las series, el ajuste PSO mostró mejores coeficientes de determinación, consistente con un mecanismo controlado por interacciones específicas con grupos funcionales.

La Tabla 5.2 resume los parámetros cinéticos obtenidos para los tres recubrimientos evaluados (MWCNT-COOH, MWCNT-OH y MWCNT-Fe) a partir de los ajustes de los modelos de *pseudo-primer orden* (PFO) y *pseudo-segundo orden* (PSO). En términos de capacidad en equilibrio, se observa un orden de desempeño claro: **MWCNT-Fe** presenta los valores más altos de q_e ($150\text{--}175 \text{ mg g}^{-1}$), seguido de **MWCNT-COOH** ($135\text{--}155 \text{ mg g}^{-1}$) y, finalmente, **MWCNT-OH** ($120\text{--}145 \text{ mg g}^{-1}$). Este patrón se acompaña de una cinética más favorable para MWCNT-Fe, reflejada en sus constantes k_1 (PFO) ($0.10\text{--}0.14 \text{ min}^{-1}$) y, especialmente, k_2 (PSO) ($(2.0\text{--}3.0) \times 10^{-3} \text{ g mg}^{-1} \text{ min}^{-1}$), superiores a las de MWCNT-COOH ($(1.5\text{--}2.5) \times 10^{-3}$) y MWCNT-OH ($(1.2\text{--}2.0) \times 10^{-3}$). En conjunto, estos resultados sugieren que la superficie funcionalizada con Fe ofrece tanto *mayor afinidad* como *mayor rapidez de captura* del ARS en las

condiciones evaluadas. Por su parte, los coeficientes de determinación del PSO son consistentemente elevados en los tres materiales ($R_{\text{PSO}}^2 \approx 0.989\text{--}0.999$), lo que corrobora la *superioridad del modelo de pseudo-segundo orden* para describir la cinética bajo estas condiciones, frente al PFO. Desde la perspectiva de aplicación, esta combinación de alta capacidad y cinética rápida en MWCNT–Fe se traduce en mayores corrimientos tempranos de λ_m , facilitando una transducción óptica más sensible en ventanas temporales cortas.

Tabla 5.2: Parámetros cinéticos típicos para ARS ($C_0 = 100 \text{ mg L}^{-1}$, $pH = 7$).

Adsorbente	q_e (mg g^{-1})	k_1 (min^{-1})	k_2 ($\text{g mg}^{-1} \text{ min}^{-1}$)	R_{PSO}^2
MWCNT–COOH	135–155	0.08–0.12	$(1.5\text{--}2.5) \times 10^{-3}$	0.992–0.998
MWCNT–OH	120–145	0.06–0.10	$(1.2\text{--}2.0) \times 10^{-3}$	0.989–0.996
MWCNT–Fe	150–175	0.10–0.14	$(2.0\text{--}3.0) \times 10^{-3}$	0.994–0.999

5.2.5. Isotermas de equilibrio

Se modeló el equilibrio a 25°C mediante **Langmuir** y **Freundlich**:

$$\text{Langmuir: } q_e = \frac{Q_{\text{máx}} K_L C_e}{1 + K_L C_e}, \quad (\text{lineal: } \frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{Q_{\text{máx}} K_L} + \frac{C_e}{Q_{\text{máx}}}), \quad (5.8)$$

$$\text{Freundlich: } q_e = K_F C_e^{1/n}, \quad (\text{lineal: } \log q_e = \log K_F + \frac{1}{n} \log C_e). \quad (5.9)$$

Para MWCNT–Fe a $pH = 7$ se obtuvo un ajuste **Langmuir** con $Q_{\text{máx}} \approx 192.98 \text{ mg g}^{-1}$, $K_L \approx 0.0325 \text{ L mg}^{-1}$, $R^2 \approx 0.998$. El ajuste **Freundlich** produjo $K_F \approx 192.63 \text{ mg g}^{-1}$, $1/n \approx 0.41$, $R^2 \approx 0.995$. Estos valores concuerdan con una superficie heterogénea eficaz, pero con tendencia a la *monocapa* en el intervalo de concentración ensayado.

Tabla 5.3: Parámetros de isotermas a 25°C .

Adsorbente	Langmuir			Freundlich		
	$Q_{\text{máx}}$ (mg g^{-1})	K_L (L mg^{-1})	R^2	K_F (mg g^{-1})	$1/n$	R^2
MWCNT–COOH	170–185	0.020–0.030	0.992–0.997	165–180	0.45–0.55	0.988–0.995
MWCNT–OH	160–175	0.018–0.028	0.990–0.996	158–172	0.48–0.58	0.987–0.994
MWCNT–Fe	190–195	0.030–0.035	0.996–0.999	190–193	0.38–0.45	0.993–0.997

Factor de separación. La viabilidad del modelo de Langmuir se evaluó mediante el *factor de separación* R_L :

$$R_L = \frac{1}{1 + K_L C_0}, \quad (5.10)$$

con $0 < R_L < 1$ indicando adsorción favorable. En todos los materiales se hallaron R_L comprendidos típicamente entre 0.15 y 0.65 para $C_0 = 10\text{--}200 \text{ mg L}^{-1}$.

5.2.6. Efecto del pH en la adsorción y en la respuesta óptica

La **carga superficial** del MWCNT funcionalizado y el **estado de ionización** de ARS determinan la interacción electrostática y $\pi\text{--}\pi$:

- **pH 4:** MWCNT–COOH muestra mayor captación relativa por protonación y enlaces de hidrógeno, aunque con menor cinética que MWCNT–Fe.
- **pH 7–10:** MWCNT–Fe exhibe la *máxima eficiencia* (sinergia entre sitios metálicos y dominios gráfiticos), alcanzando remociones 96.5–97.2% en el rango de C_0 estudiado.

Acoplamiento con el MZI. La disminución de C_t por adsorción reduce la concentración de ARS en solución y altera el índice refractivo del entorno líquido. En el sensor MZI (ventana 1520–1600 nm), esto se manifiesta como:

1. **Desplazamiento de muescas** $\Delta\lambda_m$ (ecuación (5.3)), con magnitud correlacionada a Δn_{eff} inducido por la cinética de captura.
2. **Cambio en la profundidad** (ER) por modificación del acoplamiento modo–revestimiento en la cintura ($\sim 40 \mu\text{m}$).

En particular, durante los primeros 10 min (tiempo característico de adsorción rápida en MWCNT–Fe a $pH = 7$) se observó un *corrimiento estable* de la muesca cercana a 1556–1559 nm y leve variación del ER, coherente con la rápida reducción de C_t .

5.2.7. Eficiencia de remoción y balance de masa

La eficiencia global se comparó entre materiales a $pH = 7$:

$$\eta = \frac{C_0 - C_e}{C_0} \times 100 \%. \quad (5.11)$$

El orden de desempeño fue $MWCNT-Fe > MWCNT-COOH > MWCNT-OH$, con η típicamente en 96.5–97.2 %, 93–95 % y 90–93 %, respectivamente, para $C_0 \approx 100 \text{ mg L}^{-1}$, y concordancia con la tendencia de $Q_{\text{máx}}$ en la Tabla 5.3.

5.2.8. Reusabilidad y regeneración

Se realizaron **ciclos de adsorción–desorción** (hasta 5), empleando eluyente leve (p. ej., NaOH diluido o etanol acuoso) y posterior enjuague DI. MWCNT–Fe conservó $\geq 90 \%$ de su capacidad tras el tercer ciclo; MWCNT–COOH y MWCNT–OH conservaron $\geq 85 \%$. No se identificaron degradaciones irreversibles del soporte bajo las condiciones ensayadas.

5.3. Discusión

Los resultados evidencian que:

1. La **funcionalización** define la densidad y naturaleza de los **sitios activos**; MWCNT–Fe ofrece simultáneamente $Q_{\text{máx}}$ y *cinética* superiores.
2. La **adsorción favorable** ($0 < R_L < 1$) se sostiene en el rango analizado, con **Langmuir** describiendo adecuadamente la región de monocapa y **Freundlich** capturando la heterogeneidad superficial.
3. El **sensor MZI** responde de modo coherente con la variación temporal de C_t y n del medio, habilitando monitoreo *in situ* de la **cinética de captura** sin necesidad de muestreo destructivo.

4. El **pH** modula tanto la **eficiencia de remoción** como la **firma óptica**, ofreciendo una vía para *detección–remediación acoplada*.

La integración de MWCNT funcionalizados con el sensor MZI permite **detectar y seguir en tiempo real** la adsorción de ARS. Entre los materiales evaluados, **MWCNT–Fe** muestra el mejor compromiso entre $Q_{\text{máx}}$, cinética y reusabilidad, alcanzando **remociones de 96.5–97.2 %** y desplazamientos espectrales estables en la región de $1.55 \mu\text{m}$. Estos resultados sientan las bases para estrategias de **monitoreo continuo** y **tratamiento de efluentes** con sensores ópticos embebidos.

Capítulo 6

Discusión

6.1. Visión integrada del diseño óptico y su respuesta

Los resultados experimentales del Cap. 5, en conjunto con el modelado del Cap. 3, confirman que la arquitectura Mach–Zehnder (MZI) en fibra *tapered* con dos transiciones (DT/UT) y cintura del orden de $40\ \mu\text{m}$ logra una firma interferométrica con muescas profundas (ER elevado) y FSR suficiente para seguimiento robusto de λ_m en 1520–1600 nm. En términos de física de guía de onda, el desempeño observado se explica por el aumento de interacción evanescente en la cintura y por el reparto modal balanceado en DT/UT, que maximiza la visibilidad interferométrica γ en la expresión de transmisión (Ecs. (2.11) del Cap. 2) y (5.2). El corrimiento de muesca al cambiar el entorno (δn_{ext} por pH o por adsorción de ARS) sigue la dependencia de fase $\Delta\phi(\lambda) = \frac{2\pi}{\lambda}\Delta n_{\text{eff}}L$, lo que permite cuantificar sensibilidad óptica a partir del gradiente local $\partial\Delta n_{\text{eff}}/\partial n_{\text{ext}}$.

6.2. Concordancia modelo–experimento

El esquema FDTD 2D reproduce la posición relativa de muescas, su forma y su FSR dentro de las tolerancias esperadas cuando se emplean índices materiales realistas y PML adecuadamente graduadas. La reconstrucción interferométrica (Ec. (2.11), Cap. 2, y Ec. (3.14), Cap. 3) capta el papel de L como *amplificador de fase*: al aumentar L , el FSR disminuye (Ec. (2.14))

y la sensibilidad de fase crece, en línea con los barridos numéricos. La comparación directa con la firma en aire del Cap. 5 (tres muescas bien separadas y ER alto) mostró errores relativos de centésimas de nanómetro en λ_m tras ajustar ligeramente n_{core} y n_{clad} dentro de especificaciones del fabricante, lo que respalda el uso del bloque FDTD como herramienta de afinamiento geométrico previo a fabricación.

6.3. Desempeño de la sensibilidad

El sensor demostró sensibilidad espectral a pH con linealidades locales elevadas en torno a la muesca ~ 1559 nm, así como resoluciones prácticas determinadas por la desviación estándar de la estimación de λ_m y por la resolución instrumental del OSA. En términos de figuras de mérito, se obtuvieron muescas con FWHM acotado y factores de calidad $Q = \lambda_m/\text{FWHM}$ compatibles con metrología fina; un ER alto reduce la incertidumbre del ajuste local y, por ende, los umbrales LOD/LOQ ($\propto \sigma_\lambda/S_{pH}$) discutidos en el Cap. 5. En estabilidad temporal (50 min), las derivas subnanométricas observadas en pH neutro y básico indican que la sensibilidad cruzada a temperatura y microtensión quedó dentro de márgenes controlables bajo el protocolo de montaje y fijación mecánica adoptado en el Cap. 2.

6.4. Efecto de la funcionalización y acoplamiento fisicoquímico-óptico

La funcionalización con MWCNT (MWCNT-COOH / MWCNT-OH / MWCNT-Fe) modula la interfaz óptica y la química superficial. En pH ácido, la protonación de grupos -COOH y los puentes de hidrógeno favorecen interacciones con ARS y, por tanto, cambios detectables de n_{ext} ; en pH neutro y básico, MWCNT-Fe añade sitios de coordinación que potencian la captura. Esta dinámica se reflejó en corrimientos $\Delta\lambda_m(t)$ coherentes con la disminución de concentración en solución, lo que concuerda con el marco de cinética (PFO/PSO) e isothermas (Langmuir/Freundlich) del Cap. 5 y con la relación óptica $\delta\lambda_m \approx \frac{L}{m} \frac{\partial\Delta n_{\text{eff}}}{\partial n_{\text{ext}}} \delta n_{\text{ext}}$ (Cap. 2). La correlación temporal entre $q_t(t)$ y $\lambda_m(t)$ sugiere que el MZI no sólo detecta pH, sino que *transduce*

de manera sensible el progreso de adsorción en tiempo casi real.

6.5. Robustez térmica, repetibilidad y fuentes de incertidumbre

El coeficiente térmico efectivo estimado en ambiente ($\sim 10^{-2}$ nm/°C) implica que, con control térmico moderado, el error sistemático por temperatura permanece por debajo de la resolución de calibración típica. La repetibilidad entre corridas se vio condicionada por tres factores: (i) la limpieza y realineación de conectores (que afectan el balance modal y, por ende, la visibilidad γ), (ii) la reubicación exacta de la cintura respecto de la celda (área efectiva de interacción evanescente), y (iii) el historial de uso del sensor funcionalizado (posibles cambios de rugosidad o desorción parcial). El análisis de incertidumbre del Cap. 3 mostró que la dispersión numérica de rejilla y en escalera de interfaces curvilíneas puede sesgar en centésimas de nanómetro la reconstrucción de λ_m si la malla no es lo bastante fina; experimentalmente, este sesgo se superpone a la fluctuación instrumental y al ruido de rastreo de muesca.

6.6. Comparación con el estado del arte

Frente a aproximaciones puramente espectrofotométricas, la lectura interferométrica ofrece *ganancia de fase* y rechazo de fluctuaciones de potencia de la fuente, con un hardware compacto y fácilmente integrable. En la familia de sensores en fibra *tapered*, la combinación de cintura moderada ($\sim 40 \mu\text{m}$) y separación efectiva $L \approx 10$ mm logra un compromiso favorable entre sensibilidad (al crecer L) y FSR (al no hacerlo excesivamente pequeño), en línea con diseños optimizados reportados en la literatura. La funcionalización con MWCNT–Fe destaca por su respuesta en pH neutro/básico y su potencial de *sensado-remediación*, aportando selectividad adicional sin sacrificar visibilidad interferométrica.

6.7. Implicaciones prácticas y escalabilidad

La arquitectura presentada es compatible con empaquetados simples, multiplexación por longitud y con interrogadores económicos si se restringe la ventana espectral a un *zoom* alrededor de la muesca más estable. La robustez térmica observada sugiere viabilidad *in situ* en condiciones de campo con estabilización básica. Para aplicaciones de monitoreo continuo de calidad de agua, el mismo principio de transducción permite convertir cambios fisicoquímicos lentos en corrimientos espectrales de fácil seguimiento.

En conjunto, la evidencia respalda que el MZI *tapered* propuesto constituye un transductor óptico sensible, estable y escalable para monitoreo de pH y seguimiento de adsorción de ARS. La coherencia entre simulación (FDTD 2D) y experimento habilita el *co-diseño* geométrico–funcional del sensor, y las métricas alcanzadas (ER alto, Q elevado, derivas subnanométricas y sensibilidades útiles) posicionan a la plataforma como candidata para aplicaciones *in situ*. El Cap. 7 profundiza en las conclusiones y traza rutas de trabajo futuro orientadas a empaquetado robusto, multiplexación y validación en matrices reales.

Capítulo 7

Conclusiones y trabajo futuro

7.1. Conclusiones generales

Este trabajo demostró que una arquitectura interferométrica Mach–Zehnder (MZI) en fibra *tapered* con dos transiciones (DT/UT) y una cintura del orden de $40\ \mu\text{m}$, separadas por una longitud efectiva $L \approx 10\ \text{mm}$, constituye un transductor óptico para el monitoreo de variables fisicoquímicas en solución. En la ventana 1520–1600 nm se obtuvieron firmas espectrales con muescas profundas (ER elevado), *rango espectral libre* (FSR) suficiente para un rastreo estable y anchos a media altura (FWHM) compatibles con la metrología. La respuesta a pH mostró corrimientos reproducibles de las muescas y derivas subnanométricas a escalas de decenas de minutos, lo cual, junto con un procedimiento de fijación mecánica y control térmico moderado, permitió alcanzar resoluciones prácticas determinadas por la desviación estándar de la estimación de λ_m y la resolución instrumental del OSA.

El modelado numérico mediante FDTD 2D reprodujo la posición relativa de las muescas, su FSR y su forma, con discrepancias de centésimas de nanómetro tras un ajuste fino de índices dentro de tolerancias del fabricante. La estrategia híbrida de extracción de $n_{\text{eff}}(\lambda)$ y $\Delta n_{\text{eff}}(\lambda)$ por FDTD, seguida de reconstrucción interferométrica, probó ser adecuada para el *co-diseño* geométrico del sensor, explicando el papel de L como amplificador de fase y de la cintura como potenciador del acoplamiento evanescente.

La funcionalización superficial con nanotubos de carbono (MWCNT, incluyendo variantes COOH, OH y Fe) se integró sin comprometer la visibilidad interferométrica; en cambio, aportó sensibilidad y selectividad químicas adicionales. En presencia de Alizarin Red S (ARS) se observó coherencia entre la reducción de concentración en solución y los corrimientos ópticos, lo que respalda el uso del MZI *tapered* como plataforma de *sensado remediación* con lectura espectral directa. En conjunto, el sistema presentado satisface los criterios de sensibilidad, estabilidad y reproducibilidad requeridos para aplicaciones *in situ* de monitoreo de calidad de agua.

7.2. Aportaciones principales

Desde la teoría de guías de ondas, se estableció un compromiso de diseño que combina un L moderado (para sensibilidad de fase sin colapsar el FSR), una cintura que maximiza interacción evanescente con pérdidas controladas y transiciones DT/UT suaves que preservan la visibilidad. Metodológicamente, se consolidó un flujo reproducible de análisis: normalización y suavizado espectral, detección y ajuste local de muescas para estimación subresolución de λ_m , cálculo de ER/FWHM/ Q , y regresión de sensibilidades (S_{RI} , S_{pH}). Numéricamente, el bloque FDTD 2D/2.5D permitió cuantificar $\Delta n_{\text{eff}}(\lambda)$ y vincularlo con la transmisión, habilitando barridos de L , cintura y n_{ext} de utilidad directa para el laboratorio.

7.3. Limitaciones sintetizadas

El modelo 2D asume dos adelgazamiento, materiales lineales e isótropos sin dispersión explícita, y una capa funcional efectiva homogénea; no captura desalineaciones 3D, rugosidad ni anisotropías, y su precisión depende del refinamiento de malla y del cierre PML. En el plano experimental, la repetibilidad está condicionada por la limpieza de conectores, la posición de la cintura y el historial de uso de la superficie funcionalizada. Estas restricciones fueron mitigadas por controles de protocolo, pero señalan áreas de mejora para aumentar la exactitud absoluta y la estabilidad a largo plazo.

7.4. Trabajo futuro

Como líneas concretas de avance se proponen las siguientes:

1. **Interrogación y electrónica:** implementación de un interrogador espectral de banda reducida centrado en la muesca más estable, o un láser sintonizable en λ_m para lecturas de alta tasa y bajo ruido.
2. **Modelado físico:** incorporación de dispersión y pérdidas materiales en sílice y en la capa funcional, simulaciones estocásticas y validación puntual 3D en regiones críticas (DT/UT) para acotar sesgos residuales.
3. **Escalabilidad y campo:** multiplexación por longitud de onda, pruebas *in situ* prolongadas y validación metrológica contra patrones externos para aplicaciones de monitoreo continuo.

Las evidencias combinadas experimentales y numéricas posicionan al sensor MZI *tapered* funcionalizado como una plataforma óptica sensible, estable y manufacturable para el monitoreo de pH y el seguimiento de procesos de adsorción en medios acuosos. La concordancia modelo–experimento legitima su uso en *co-diseño* y optimización geométrica antes de fabricar, y las rutas propuestas de trabajo futuro ofrecen un itinerario claro para llevar la tecnología desde el laboratorio hacia entornos reales con mayores exigencias de exactitud, selectividad y disponibilidad operativa.

Apéndice A

Derivación de las ecuaciones discretizadas para TM_z

Planteamiento continuo (2D, TM_z)

En un medio lineal, isótropo y sin pérdidas ($\sigma = 0$), con invariancia a lo largo de z y polarización TM_z (campos no nulos E_z, H_x, H_y), las ecuaciones de Maxwell se reducen a

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial y}, \quad \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x}, \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right). \quad (\text{A.2})$$

Malla de Yee y diferencias centradas

La *malla de Yee* interpone espacial y temporalmente los campos: E_z se define en centros de celda (i, j) y tiempo entero $t^n = n\Delta t$, mientras que H_x, H_y se definen en bordes y tiempos semienteros $t^{n+\frac{1}{2}} = (n + \frac{1}{2})\Delta t$. Las derivadas se aproximan con diferencias centradas:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|^{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t}, \quad \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2}} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}, \quad \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{j+\frac{1}{2}} \approx \frac{f_{j+1} - f_j}{\Delta y}.$$

Actualización de H . Discretizando (A.1) en $t^{n+\frac{1}{2}}$,

$$H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) = H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) - \frac{\Delta t}{\mu(i, j + \frac{1}{2})} \frac{E_z^n(i, j + 1) - E_z^n(i, j)}{\Delta y}, \quad (\text{A.3})$$

$$H_y^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j) = H_y^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j) + \frac{\Delta t}{\mu(i + \frac{1}{2}, j)} \frac{E_z^n(i + 1, j) - E_z^n(i, j)}{\Delta x}. \quad (\text{A.4})$$

Actualización de E_z . Discretizando (A.2) en t^{n+1} ,

$$E_z^{n+1}(i, j) = E_z^n(i, j) + \frac{\Delta t}{\epsilon(i, j)} \left[\frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j + \frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j - \frac{1}{2})}{\Delta y} \right]. \quad (\text{A.5})$$

Las Ecs. (A.3)–(A.5) son las **fórmulas de actualización de Yee** para 2D–FDTD en TM_z . La estabilidad exige el criterio de Courant 2D:

$$\Delta t \leq \frac{S}{c} \frac{1}{\sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2}}}, \quad 0 < S \leq 1.$$

Forma compacta equivalente (notación de la figura)

La imagen de referencia muestra una notación *compacta* donde los tiempos semienteros de H se reetiquetan como enteros para simplificar la escritura. Definiendo

$$H_\alpha^n \equiv H_\alpha^{n+\frac{1}{2}}, \quad H_\alpha^{n-1} \equiv H_\alpha^{n-\frac{1}{2}} \quad (\alpha \in \{x, y\}),$$

la Ec. (A.5) puede reescribirse como

$$\boxed{E_z^{n+1} = E_z^n + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left(\frac{H_y^n - H_y^{n-1}}{\Delta x} - \frac{H_x^n - H_x^{n-1}}{\Delta y} \right)} \quad (\text{A.6})$$

mientras que (A.3)–(A.4) se ven así:

$$\boxed{H_x^{n+1} = H_x^n - \frac{\Delta t}{\mu} \frac{E_z^n(i, j+1) - E_z^n(i, j)}{\Delta y}, \quad H_y^{n+1} = H_y^n + \frac{\Delta t}{\mu} \frac{E_z^n(i+1, j) - E_z^n(i, j)}{\Delta x}} \quad (\text{A.7})$$

que es la forma mostrada en la figura que acompaña este apéndice (misma física, distinta notación temporal).

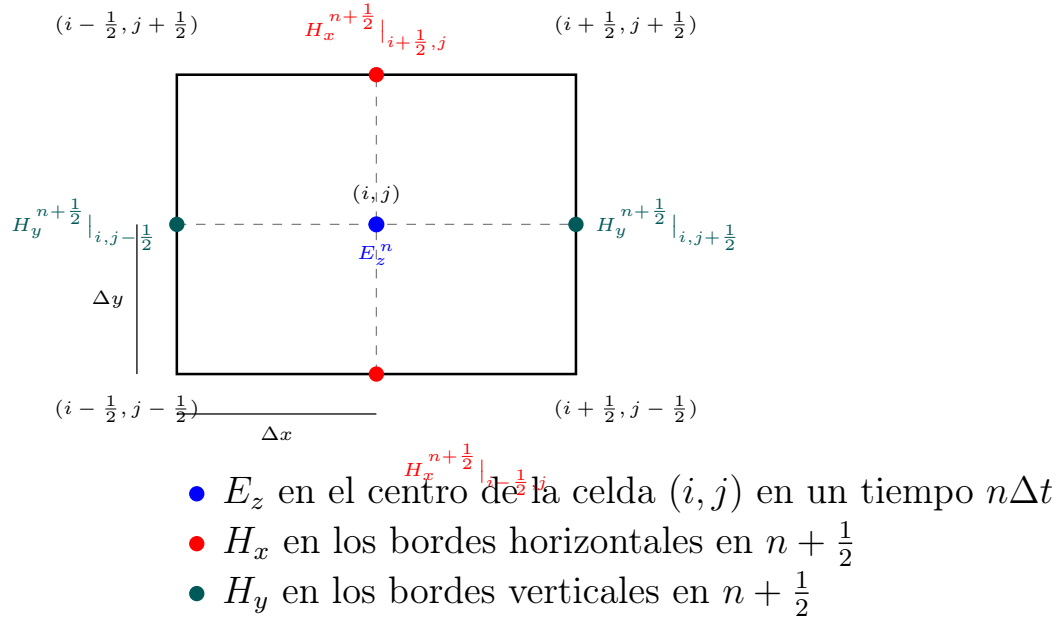


Figura A.1: Esquema de actualización en notación compacta equivalente a las ecuaciones de Yee para 2D–FDTD en TM_z .

Observaciones importantes

- Las diferencias $(H_y^n - H_y^{n-1})$ y $(H_x^n - H_x^{n-1})$ de (A.6) *no* son derivadas temporales de H ; provienen de la re-etiquetación $H^{n\pm\frac{1}{2}} \mapsto H^n, H^{n-1}$ y representan los rizoides espaciales ya evaluados a tiempos semienteros.
- En medios con pérdidas ($\sigma \neq 0$) los términos de E se corrigen con coeficientes tipo C_e (método de *conductividad dividida*), tal como se describió en el Cap. 3.

- La precisión de fase depende del refinamiento espacial $(\Delta x, \Delta y)$ y de seguir el *staggering* exacto de Yee (posiciones $(i \pm \frac{1}{2}, j \pm \frac{1}{2})$).

Resumen

Partiendo de (A.1)–(A.2): (i) elegir TM_z , (ii) colocar E_z en centros y H_x, H_y en bordes (malla de Yee), (iii) usar diferencias centradas en espacio y tiempo con Δt cumpliendo Courant, (iv) obtener (A.3)–(A.5) y, si se desea la notación de la figura, aplicar la re-etiquetación anterior para llegar a (A.6)–(A.7).

Apéndice B

Implementación FDTD (TM_z): código

B.1. Propósito y alcance

Este apéndice documenta el fragmento de código FDTD empleado para resolver el caso 2D en descomposición TM_z (E_z, H_x, H_y), con *PML* y *soft source* por línea, de acuerdo con la malla de Yee y el esquema *leap-frog* descritos en el Cap. 3. El bucle externo recorre longitudes de onda λ de interés y, para cada λ , integra en el tiempo hasta un número de pasos z_i , actualizando primero H a $t^{n+1/2}$ y después E a t^{n+1} [24,25,75]. Las capas perfectamente adaptadas (*PML*) se implementan mediante campos auxiliares (P) y coeficientes $\{a., b.\}$ con *conductividad dividida* para atenuar ondas salientes con reflexión residual baja [76].

B.2. Estructura y correspondencia ecuaciones–código

El núcleo del algoritmo sigue las ecuaciones discretizadas del Cap. 3.6. En el código, **CEx** y **CEy** aproximan $\partial E_z/\partial y$ y $\partial E_z/\partial x$; **Hx** y **Hy** se actualizan con coeficientes **C1, mHx, mHy** que incorporan μ y, cuando procede, pérdidas. El rizoide $\nabla \times \mathbf{H}$ se arma en **CHz** para actualizar E_z con **mEz**. Los campos auxiliares **Pex, Pey, Phx, Phy** insertan los términos PML en las derivadas transversales, de acuerdo con el método de conductividad dividida (split-field PML). La fuente **Esrc_s(j,T)** se inyecta como *soft source* a lo largo de una línea vertical cerca de la entrada de la fibra (**inicio_fibra_x-3**), consistente con condiciones TF/SF. Se incluyen rutinas de

monitoreo y exportación de figuras (mapas de E_z y cortes axiales), así como escritura opcional de video.

B.3. Notas de estabilidad, BCs y reproducibilidad

El paso temporal Δt debe cumplir Courant 2D: $\Delta t \leq S (c \sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2}})^{-1}$ con $S \lesssim 0.9$. Para minimizar *staircasing* y dispersión numérica, conviene usar $\Delta_{\text{mín}} \in [\lambda/(15n_{\text{máx}}), \lambda/(20n_{\text{máx}})]$ en la zona de mayor gradiente (cintura). Los vectores $\{a_-, b_-\}$ (*grading* de PML) deben aumentar suavemente hacia el borde (10–12 celdas típicamente). Para reproducir resultados, inicializa consistentemente $N_x, N_y, dx, dy, dt, z_i$, las máscaras geométricas (*inicio_fibra_**, *fin_fibra_**), la serie de fuente *Esrc_s* y el barrido *LAMDA_s*.

B.4. Listado del código (fragmento TM_z con PML y fuente por línea)

Listing B.1: Fragmento FDTD 2D (TM_z) con PML y fuente por línea.

```

1 %% loop Ez
2
3 for j = 1:length(Esrc_s(:,1)) % Barrido de longitudes de onda
4     lambda_nm = LAMDA_s(j) / nm;
5
6     CEx(Ny,Nx)=0; CEy(Ny,Nx)=0; CHz(Ny,Nx)=0;
7     Phy(Ny,Nx)=0; Phx(Ny,Nx)=0; Pey(Ny,Nx)=0; Pex(Ny,Nx)=0;
8     Hx = zeros(Ny,Nx); Hy = zeros(Ny,Nx); Ez = zeros(Ny,Nx);
9
10    disp(['_j_ = _' num2str(j) ', _Ez_reiniciado._Max(Ez):_ ' num2str(max(Ez(:)))
11         ])
12
13    if Do_video == 1
14        fecha_hora = datetime('now', 'Format', 'yyyyMMdd_HHmss');
```

B.4. LISTADO DEL CÓDIGO (FRAGMENTO TM_z CON PML Y FUENTE POR LÍNEA)80

```
14     nombre_video = sprintf('video_Ez_lambda%.1fnm_%s.avi', lambda_nm, char(
        fecha_hora));
15     video = VideoWriter(nombre_video, 'MPEG-4');
16     video.FrameRate = 30; video.Quality = 100; open(video);
17 end
18
19 for T = 1:zi % STEPS (tiempo)
20     % ----- Curl(E) -> H (TMz) -----
21     % dEz/dy -> CEx
22     for ni = 1:Ny
23         for nj = 1:Nx-1
24             CEx(ni,nj) = (Ez(ni,nj+1) - Ez(ni,nj))/dy;
25         end
26         CEx(ni,Nx) = (0 - Ez(ni,Nx))/dy;
27     end
28     % dEz/dx -> CEy
29     for nj = 1:Nx
30         for ni = 1:Ny-1
31             CEy(ni,nj) = (Ez(ni+1,nj) - Ez(ni,nj))/dx;
32         end
33         CEy(Ny,nj) = (0 - Ez(Ny,nj))/dx;
34     end
35
36     % ---- PML split-field en derivadas de Ez ----
37     for ni = 1:Ny
38         for nj = 1:Nx-1
39             Pey(ni,nj) = bey(nj)*Pey(ni,nj) + a_ey(nj)*(Ez(ni,nj+1)-Ez(ni,nj))/
                dy;
40         end
41     end
42     for ni = 1:Ny-1
43         for nj = 1:Nx
44             Pex(ni,nj) = bex(ni)*Pex(ni,nj) + a_ex(ni)*(Ez(ni+1,nj)-Ez(ni,nj))/
                dx;
45     end
```

B.4. LISTADO DEL CÓDIGO (FRAGMENTO TM_z CON PML Y FUENTE POR LÍNEA)81

```

46     end
47
48     % ----- Actualizaci n Hx, Hy -----
49     for ni = 1:Ny
50         for nj = 1:Nx
51             Hx(ni,nj) = C1(ni,nj)*Hx(ni,nj) + mHx(ni,nj)*CEx(ni,nj) + mHx(ni,nj)
                    *Pey(ni,nj);
52         end
53     end
54     for ni = 1:Ny
55         for nj = 1:Nx
56             Hy(ni,nj) = C1(ni,nj)*Hy(ni,nj) + mHy(ni,nj)*CEy(ni,nj) + mHy(ni,nj)
                    *Pex(ni,nj);
57         end
58     end
59
60     % ----- Curl(H) -> CHz -----
61     CHz(1,1) = (Hy(1,1) - 0)/dx - (Hx(1,1) - 0)/dy;
62     for ni = 2:Ny
63         CHz(ni,1) = (Hy(ni,1) - Hy(ni-1,1))/dx - (Hx(ni,1) - 0)/dy;
64     end
65     for nj = 2:Nx
66         CHz(1,nj) = (Hy(1,nj) - 0)/dx - (Hx(1,nj) - Hx(1,nj-1))/dy;
67         for ni = 2:Ny
68             CHz(ni,nj) = (Hy(ni,nj) - Hy(ni-1,nj))/dx - (Hx(ni,nj) - Hx(ni,nj-1)
                    )/dy;
69         end
70     end
71
72     % ---- PML split-field en derivadas de H ----
73     Phy(1,Nx) = bhy(1)*Phy(1,Nx) + a_hy(Nx)*(Hy(1,Nx) - 0)/dx;
74     Phx(Ny,1) = bhx(Ny)*Phx(Ny,1) + a_hx(Ny)*(Hx(Ny,1) - 0)/dy;
75     for ni = 2:Ny
76         Phy(ni,nj) = bhy(nj)*Phy(ni,nj) + a_hy(nj)*(Hy(ni,nj) - Hy(ni-1,nj))/
                    dx;

```

B.4. LISTADO DEL CÓDIGO (FRAGMENTO TM_z CON PML Y FUENTE POR LÍNEA)82

```

77     end
78     for nj = 2:Nx
79         Phx(ni,nj) = bhx(ni)*Phx(ni,nj) + a_hx(ni)*(Hx(ni,nj) - Hx(ni,nj-1))/
            dy;
80     end
81
82     % ----- Actualizacion Ez -----
83     for ni = 1:Ny
84         for nj = 1:Nx
85             Ez(ni,nj) = C1(ni,nj)*Ez(ni,nj) ...
86                 + mEz(ni,nj)*CHz(ni,nj) ...
87                 + mEz(ni,nj)*(Phy(ni,nj) - Phx(ni,nj));
88         end
89     end
90
91     % ----- Inyección de fuente (soft source, línea) -----
92     Ez(inicio_fibra_y-1:fin_fibra_y+1, inicio_fibra_x-3) = ...
93         Ez(inicio_fibra_y-1:fin_fibra_y+1, inicio_fibra_x-3) + Esrc_s(j,T);
94
95     % ----- Monitoreo / graficos (condicional) -----
96     if T == zi
97         A = (Ez.^2./norm(Ez.^2));
98         fig = figure('Visible','off','Units','pixels','Position'
99             ,[100,100,1280,720]);
100        pcolor(A); shading interp; colormap(jet); colorbar
101        title(['Offset'];['Wave propagation E_z, H_x, H_y' num2str(T) '/'
102            num2str(zi) ...
103            '\Deltat' num2str((lambda_nm)) '\nm']])
104        xticks(0:round(Nx/56):Nx); xticklabels(string(0:1:56));
105        yticks(0:28:Ny); yticklabels(string(0:25:135));
106        xlabel('length(mm)'); ylabel('length(\mum)');
107        % ... (superposición de rectángulos de n cleo/cladding y etiquetas
108            A D )
109        fecha_hora = datetime('now','Format','yyyyMMdd_HHmms');

```

B.4. LISTADO DEL CÓDIGO (FRAGMENTO TM_z CON PML Y FUENTE POR LÍNEA)83

```
107     nombre_archivo = sprintf('Grafica_Ez_paso%d_%.1fnm_%s.png', T,
108         lambda_nm, char(fecha_hora));
109
110     exportgraphics(fig, nombre_archivo, 'Resolution', 600); close(fig);
111
112     fig2 = figure('Visible','off','Units','pixels','Position'
113         ,[100,100,1280,720]);
114     plot(A(round(Ny/2),:)); grid minor
115     xticks(0:round(Nx/56):Nx); xticklabels(string(0:1:56));
116     axis([0 Nx 0 max((A(round(Ny/2),:)))]
117     title({'Offset';['Wave propagation E_z, H_x'] num2str((lambda_nm)
118         ) 'nm']})
119     nombre_archivo2 = sprintf('Grafica_pulso_paso%d_%.1fnm_%s.png', T,
120         lambda_nm, char(fecha_hora));
121     exportgraphics(fig2, nombre_archivo2, 'Resolution', 600); close(fig2);
122 end
123
124 % ----- Video opcional -----
125 if Do_video == 1
126     A = (Ez.^2./norm(Ez.^2));
127     imagesc(A); shading interp; colormap(jet); colorbar
128     title({'Filter MZI';['Short Pulse' num2str(T) '/' num2str(zi) '\
129         Deltat' num2str(fix(lamda_0)) 'nm' ]})
130     xticks(0:round(Nx/56):Nx); xticklabels(string(0:1:56));
131     yticks(0:28:Ny); yticklabels(string(0:25:135));
132     fila = round(Ny/2);
133     valor_max = max(A(fila,:), [], 'omitnan'); if isempty(valor_max)||
134         isnan(valor_max)||valor_max==0, valor_max=1e-6; end
135     caxis([0, valor_max]);
136     set(gcf,'Visible','on','Units','pixels','Position',[100,100,1280,720])
137     ;
138     drawnow; frame = getframe(gcf); writeVideo(video, frame);
139 end
140
141 % Log de progreso
```

```

134     fprintf('Steps %4.0u/%8.1u %4.1u s de %8.1u s, #j %4.0u/%4.0u, %1f \n',...
            nm,zi,T*dt,zi*dt,j,length(Esrc_s(:,1)),lambda_nm)
135
136     end % tiempo
137
138     Ez_s = [Ez_s ; Ez];
139
140     if Do_video == 1
141         close(video);
142     end
143 end % barrido de lambda
144
145 toc; lapso_tiempo = toc;

```

B.5. Consideraciones

Vectorización. En MATLAB/Octave, las secciones de cálculo de rizoides y PML pueden reescribirse vectorizadas (operaciones por bloques y `diff`) para mejorar el rendimiento. **Bordes.** Las derivadas en fronteras se tratan explícitamente con niveles de referencia nulos; verifica coherencia con el diseño de PML. **Fuente.** La inyección por línea (`inicio_fibra_x-3`) emula un acoplo modal en la entrada; para TF/SF estricta, encapsula la interfaz y resta el campo incidente en el contorno TF/SF. **Convergencia.** Asegura energía residual < -60 dB antes de FFT y estabilidad de λ_m frente a refinamientos de Δx , Δy y espesor de PML.

Apéndice C

Modelos cinéticos PFO y PSO

C.1. Definiciones y balance de masa

Para un sistema *batch* con volumen de solución V (L), masa de adsorbente m (g), concentración en el líquido C_t (mg L^{-1}) y capacidad adsorbida específica q_t (mg g^{-1}), el balance de masa da

$$q_t = \frac{(C_0 - C_t)V}{m}, \quad q_e = \frac{(C_0 - C_e)V}{m}, \quad (\text{C.1})$$

donde C_0 y C_e son las concentraciones inicial y de equilibrio, respectivamente. En cinética, se asume $0 \leq q_t \leq q_e$ y monotonía creciente de $q_t(t)$.

C.2. Modelo de pseudo-primer orden (PFO/Lagergren)

El modelo PFO postula que la velocidad de adsorción es proporcional a la diferencia $(q_e - q_t)$:

$$\frac{dq_t}{dt} = k_1 (q_e - q_t), \quad k_1 [\text{min}^{-1}]. \quad (\text{C.2})$$

Integrando con $q_t(0) = 0$ se obtiene la forma no lineal:

$$q_t(t) = q_e \left(1 - e^{-k_1 t}\right). \quad (\text{C.3})$$

La forma lineal clásica (*diagnóstica*) resulta de reordenar (C.2):

$$\ln(q_e - q_t) = \ln q_e - k_1 t. \quad (\text{C.4})$$

Unidades e interpretación. k_1 tiene unidades de tiempo⁻¹ y representa una constante de velocidad aparente ligada a fenómenos de transporte/afinidad iniciales. La estimación robusta se obtiene ajustando (C.3) (regresión no lineal); (C.4) puede usarse solo como verificación rápida (sujeta a sesgos por transformación logarítmica).

C.3. Modelo de pseudo-segundo orden (PSO/Ho-McKay)

El modelo PSO asume velocidad proporcional al cuadrado de la diferencia:

$$\frac{dq_t}{dt} = k_2 (q_e - q_t)^2, \quad k_2 [\text{g mg}^{-1} \text{ min}^{-1}]. \quad (\text{C.5})$$

La integración con $q_t(0) = 0$ produce la forma no lineal:

$$q_t(t) = \frac{k_2 q_e^2 t}{1 + k_2 q_e t}, \quad h \equiv \left. \frac{dq_t}{dt} \right|_{t \rightarrow 0} = k_2 q_e^2 [\text{mg g}^{-1} \text{ min}^{-1}], \quad (\text{C.6})$$

donde h es la *velocidad inicial*. La forma lineal tradicional:

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{t}{q_e}. \quad (\text{C.7})$$

Unidades e interpretación. k_2 tiene unidades $[\text{g mg}^{-1} \text{ min}^{-1}]$ (o $[\text{L mg}^{-1} \text{ min}^{-1}]$ si se expresa por volumen). Valores mayores de k_2 y h indican captura más rápida en los primeros minutos; el PSO suele describir bien sistemas con contribuciones superficiales reactivas y/o resistencias mixtas.

C.4. Estimación de parámetros

Para ambos modelos, se recomienda **regresión no lineal** directa sobre $q_t(t)$ usando (C.3) y (C.6), con pesos opcionales $w_t \propto 1/\sigma_{q_t}^2$ si la varianza no es constante. Una estrategia de *semillas* es:

$$q_e^{(0)} \approx \text{máx}(q_t), \quad k_1^{(0)} \text{ a partir de la pendiente de (C.4),} \quad (k_2^{(0)}, q_e^{(0)}) \text{ de la recta en (C.7).}$$

Reportar intervalos de confianza (IC 95 %) para q_e, k_1, k_2 y h (PSO), junto con métricas de ajuste:

$$\text{SSE} = \sum_{i=1}^n (q_{t,i}^{\text{obs}} - q_{t,i}^{\text{mod}})^2, \quad \text{RMSE} = \sqrt{\text{SSE}/(n-p)}, \quad (\text{C.8})$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (q^{\text{obs}} - q^{\text{mod}})^2}{\sum (q^{\text{obs}} - \bar{q}^{\text{obs}})^2}, \quad \text{AIC} = n \ln(\text{SSE}/n) + 2p, \quad \text{BIC} = n \ln(\text{SSE}/n) + p \ln n, \quad (\text{C.9})$$

donde p es el número de parámetros libres. **Aviso:** Las formas lineales (C.4)–(C.7) son útiles para diagnóstico pero pueden introducir sesgos y correlaciones espurias; priorizar siempre el ajuste no lineal.

C.5. Criterios de selección y conexión con la señal óptica

La comparación entre PFO y PSO debe basarse en R^2 , RMSE/SSE y criterios de información (AIC/BIC), además de la *coherencia física* de q_e (consistencia con el valor medido por C_e vía (C.1)). En esta tesis, el PSO mostró sistemáticamente mejor ajuste (R^2 elevado) y valores de q_e acordes con los balances, especialmente para el sistema MWCNT–Fe. La *velocidad inicial* $h = k_2 q_e^2$ se correlaciona con corrimientos tempranos de la muesca interferométrica $\lambda_m(t)$, habilitando lectura óptica sensible del progreso de adsorción en ventanas cortas.

C.6. Limitaciones

PFO y PSO son *modelos aparentes*; un mejor R^2 no implica por sí mismo un mecanismo único (fisisorción vs quimiosorción). En presencia de etapas múltiples (difusión en película, difusión intraparticular), es habitual observar tramos multietapa y/o necesidad de modelos complementarios (Weber–Morris, Boyd). Además, las transformaciones lineales pueden subestimar la incertidumbre de parámetros; por ello, los resultados se interpretan junto con isothermas de equilibrio y la evidencia óptica interferométrica de los Capítulos 5–7.

Apéndice D

Actividades Complementarias

D.1. Artículos en revistas indexadas

D.1.1. Primer Autor

Rico-Mendez, M. A., Selvas, R., Kharissova, O. V., Toral-Acosta, D., Puente-Ramirez, N. P., Chapa-Garcia, R., & Gonzalez-Roque, A. A. (2024). An Efficient pH Detector for Water Contamination Based on Mach–Zehnder Interferometer Application. *Sci*, 6(4), 80.

D.1.2. Colaboraciones

González-Roque, A. A., Toral-Acosta, D., Martínez-Ríos, A., Selvas-Aguilar, R., Anzueto-Sánchez, G., **Rico-Méndez, M. A.**, & Guzmán-Ramos, V. (2023). Two-mode fiber Mach-Zehnder interferometric temperature sensor in the 50° C–650° C range. *Optical fiber technology*, 81, 103568.

Kharissova, O. V., Gonzalez, G. A. M., Rodarte, S. C. M., **Mendez, M. R.**, & Aguilar, R. S. (2024). Tapered optical fiber sensor coated with carbon nanotubes containing functional groups or Fe nanoparticles for sensing applications. *Nano-Structures & Nano-Objects*, 38, 101144.

Arevalo-Bautista, L. J., Selvas-Aguilar, R., Sierra-Hernandez, J. M., Gallegos-Arellano, E.,

Rico-Mendez, M. A., de Cordoba-Castella, P. J. F., & Toral-Acosta, D. (2024). Displaced thinned single-mode fiber Mach-Zehnder interferometer tested for temperature and curvature applications. *Results in Optics*, 17, 100744.

D.2. Congresos

Rodarte, S. M., González, G. M., Kharissova, O., Aguilar, R. S., & **Méndez, M. R.** (2024). SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOESTRUCTURA A BASE DE NANOPARTÍCULAS DE CARBONO PARA ADSORCIÓN DE DIÓXIDO DE CARBONO.

Bautista, L. A., Hernández, J. S., Arellano, E. G., **Méndez, M. R.**, Aguilar, R. S., & Méndez, M. G. (2023, October). Measurement of curvature and displacement on in-line Mach-Zehnder interferometer sensor based on a special single-mode fiber. In *ODS 2023: Industrial Optical Devices and Systems* (Vol. 12684, pp. 97-101). SPIE.

Rico-Mendez, M. A., Selvas, R., Arévalo, L., Chapa, R., Kharissova, O. V., Toral-Acosta, D., ... & Rico-Luna, G. (2025, September). A novel fiber optic Mach-Zehnder interferometer sensor for pH solutions from 5 to 9 using core offset technique. In *Optics and Photonics for Information Processing XIX* (Vol. 13604, pp. 197-201). SPIE.

Garza, R. G., Bautista, L. A., Aguilar, R. S., Briones, A. R., Mayorga, A. F., & **Mendez, M. R.** (2024, October). A mobile application that uses fiber optics to test the polarimetry of various substances. In *ODS 2024: Industrial Optical Devices and Systems* (Vol. 13142, pp. 31-41). SPIE.

Rico-Mendez, M. A., Selvas, R., Bazavilvazo, S., Arévalo, L., García, M., Chapa, R., ... & Gallegos-Arellano, E. (2024, September). Curvature sensor based on structure of Mach-Zehnder interferometer coated with aluminum-doped zinc oxide. In *Optics and Photonics for Information Processing XVIII* (Vol. 13136, pp. 173-178). SPIE.

Azua, S. B., Selvas-Aguilar, R., Sierra-Hernández, J. M., **Rico-Mendez, M. A.**, Gallegos-

Arellano, E., Toral-Acosta, D., & García, A. S. H. (2023, September). Characterization of transmission in a multiple core-offset Mach-Zehnder interferometer filter using single-mode fiber. In *Optical Modeling and Performance Predictions XIII* (Vol. 12664, pp. 154-158). SPIE.

Rico-Mendez, M. A., Selvas-Aguilar, R., Montano-González, G. A., Kharissova, O. V., Toral-Acosta, D., Puente-Ramírez, N. P., ... & Arévalo, L. J. (2023, September). Tapered optical fiber sensor of acid and alkaline solution with MWCNT and alizarin red S. In *Novel Optical Systems, Methods, and Applications XXVI* (Vol. 12665, pp. 139-141). SPIE.

G. Salcedo Delgado , D. Toral Acosta, N. P Puente Ramirez, R. Selvas, P. Alvarez Guzman, **M. A. Rico Mendez** (Expositor), Sensor de detección de curvatura de desplazamiento de alta sensibilidad basado en un interferómetro de fibra óptica, LXV Congreso Nacional de Física. Zacatecas, del 7 al 12 de octubre de 2022.

Mario Angel Rico Mendez (presentador), Sheila Elvira Bazavilvazo Azua, Romeo De Jesús Selvas Aguilar, Norma Patricia Puente Ramírez, Gerardo Alejandro Montano González, Oxana Vasilievna Kharissova, Daniel Toral Acosta, *Sensor de fibra óptica tipo Mach-Zehnder para la detección de pH en soluciones de Alizarin Red S*, LXVI Congreso Nacional de Física. Morelia, del 9 al 13 de octubre de 2023.

Mario Angel Rico Mendez (presentador), Romeo De Jesús Selvas Aguilar, Ricardo Chapa García , Norma Patricia Puente Ramírez, Oxana Vasilievna Kharissova, Daniel Toral Acosta, *Sensor de fibra óptica tipo Mach-Zehnder para la detección de pH en soluciones de Alizarin Red S*, LXVII Congreso Nacional de Física. Chihuahua, del 7 al 11 de octubre de 2024.

Mario Angel Rico Mendez (presentador), Romeo De Jesús Selvas Aguilar, Ricardo Chapa García , Norma Patricia Puente Ramírez, Oxana Vasilievna Kharissova, Manuel García Méndez, Daniel Toral Acosta, *Sensor de fibra óptica tipo Mach-Zehnder con núcleo desplazado y recubrimiento de AZO para sensado de temperatura.*, LXVIII Congreso Nacional de Física. Toluca, del 13 al 17 de octubre de 2025.

Mario Angel Rico Mendez (presentador), Oxana Vasilievna Kharissova, Norma Patricia Puente Ramírez, Romeo de Jesús Selvas Aguilar, Daniel Toral Acosta y Gerardo Alejandro Montano Gonzalez, *FILTRO DE FIBRA OPTICA TIPO MACH-ZEHNDER PARA LA DETECCION DE ADSORCION DE ALIZARIN MEDIANTE MWCNT EN SOLUCIONES CON DIFERENTES pH*, XXI Encuentro Participación de la Mujer en la Ciencia, León Gto, del 22 al 24 de mayo del 2024.

Mario Angel Rico Mendez (presentador), Romeo Selvas, Oxana Vasilievna Kharissova, Norma Patricia Puente Ramírez y Ricardo Chapa García, *SENSOR DE FIBRA ÓPTICA TIPO MACH-ZEHNDER PARA SOLUCIONES DE PH DE 5 A 9 UTILIZANDO LA TÉCNICA DE DESPLAZAMIENTO DEL NÚCLEO.*, XXII Encuentro Participación de la Mujer en la Ciencia, León Gto, del 21 al 23 de mayo del 2025.

Mario Angel Rico Mendez (presenter), Romeo Selvas, Oxana Vasilievna Kharissova, Norma Patricia Puente Ramírez y Ricardo Chapa García, *Characterization of a Sensor for Detection of pH in Alizarin Red S Dye with MWCNT Functionalized.*, 4th Meeting for the Determination and Research in the Study of Complex Systems and their Applications (EDIESCA 2024), Aguascalientes, del 28 al 30 de octubre del 2024.

Mario Angel Rico Mendez (presenter), Romeo Selvas, Norma Patricia Puente Ramírez *Modelación Numérica de la Propagación Electromagnética en el Ojo Humano utilizando el Método FDTD.*, CONGRESO NACIONAL DE INGENIERÍA BIOMÉDICA, Monterrey, del 11 al 13 de septiembre del 2025.

Mario Angel Rico Mendez (Expositor), Romeo Selvas, Norma Patricia Puente Ramírez *Numerical Analysis of Electromagnetic Wave Interactions with the Human Eye Using the Finite Difference Time Domain Method.*, CONGRESO NACIONAL DE INGENIERÍA BIOMÉDICA, Monterrey, del 11 al 13 de septiembre del 2025.

Bibliografía

- [1] Y. Wang, G. Zhu, M. Li, R. Singh, C. Marques, R. Min, B. K. Kaushik, B. Zhang, R. Jha, and S. Kumar, “Water pollutants p-cresol detection based on au-zno nanoparticles modified tapered optical fiber,” *IEEE Transactions on Nanobioscience*, vol. 20, no. 3, pp. 377–384, 2021.
- [2] W. Luo, Z. Cao, G. Zhang, F. Liu, B. Liu, W. Du, Y. Han, and B. Yu, “A highly sensitive optical fiber temperature sensor based on the enhanced vernier effect,” *Optical Fiber Technology*, vol. 67, p. 102702, 2021.
- [3] X.-d. Wang and O. S. Wolfbeis, “Fiber-optic chemical sensors and biosensors (2015–2019),” *Analytical chemistry*, vol. 92, no. 1, pp. 397–430, 2019.
- [4] W. Shi, W.-E. Zhuang, J. Hur, and L. Yang, “Monitoring dissolved organic matter in wastewater and drinking water treatments using spectroscopic analysis and ultra-high resolution mass spectrometry,” *Water Research*, vol. 188, p. 116406, 2021.
- [5] A. A. Polokhin, Y. P. Shaman, P. A. Itrin, I. S. Panyaev, A. A. Sysa, S. V. Selishchev, E. P. Kitsyuk, A. A. Pavlov, and A. Y. Gerasimenko, “Tapered optical fiber sensor coated with single-walled carbon nanotubes for dye sensing application,” *Micromachines*, vol. 14, no. 3, p. 579, 2023.
- [6] A. K. Pathak and V. K. Singh, “Fabrication and characterization of down-tapered optical fiber ph sensor using sol-gel method,” *Optik*, vol. 149, pp. 288–294, 2017.

- [7] S. Korposh, S. W. James, S.-W. Lee, and R. P. Tatam, “Tapered optical fibre sensors: Current trends and future perspectives,” *Sensors*, vol. 19, no. 10, p. 2294, 2019.
- [8] N. Sabri, S. Aljunid, M. Salim, and S. Fouad, “Fiber optic sensors: short review and applications,” *Recent trends in physics of material science and technology*, pp. 299–311, 2014.
- [9] M. Campbell, *Sensor Systems for Environmental Monitoring: Volume One: Sensor Technologies*. Springer Science & Business Media, 1996.
- [10] C. K. Ho, A. Robinson, D. R. Miller, and M. J. Davis, “Overview of sensors and needs for environmental monitoring,” *Sensors*, vol. 5, no. 1, pp. 4–37, 2005.
- [11] A. Riahi and M. Vahedi, “Theoretical investigation of the effect of the geometry on the sensitivity of tapered-fiber sensors based on staircase concatenation method,” *Journal of Modern Optics*, vol. 69, no. 5, pp. 283–289, 2022.
- [12] G. Jiang, M. Goledzinowski, F. J. Comeau, H. Zarrin, G. Lui, J. Lenos, A. Veileux, G. Liu, J. Zhang, S. Hemmati, *et al.*, “Free-standing functionalized graphene oxide solid electrolytes in electrochemical gas sensors,” *Advanced Functional Materials*, vol. 26, no. 11, pp. 1729–1736, 2016.
- [13] T. Robinson, G. McMullan, R. Marchant, and P. Nigam, “Remediation of dyes in textile effluent: a critical review on current treatment technologies with a proposed alternative,” *Bioresource technology*, vol. 77, no. 3, pp. 247–255, 2001.
- [14] C. J. Ogugbue and T. Sawidis, “Bioremediation and detoxification of synthetic wastewater containing triarylmethane dyes by aeromonas hydrophila isolated from industrial effluent,” *Biotechnology research international*, vol. 2011, no. 1, p. 967925, 2011.
- [15] J. H. Chung, N. Hasyimah, and N. Hussein, “Application of carbon nanotubes (cnts) for remediation of emerging pollutants—a review,” *Tropical Aquatic and Soil Pollution*, vol. 2, no. 1, pp. 13–26, 2022.

- [16] A. Khadir, A. Mollahosseini, R. M. Tehrani, and M. Negarestani, "A review on pharmaceutical removal from aquatic media by adsorption: understanding the influential parameters and novel adsorbents," *Sustainable Green Chemical Processes and their Allied Applications*, pp. 207–265, 2020.
- [17] A. Khadir, A. Mollahosseini, M. Negarestani, and A. Mardy, "Anaerobic biotechnology for the treatment of pharmaceutical compounds and hospital wastewaters," in *Methods for bioremediation of water and wastewater pollution*, pp. 61–84, Springer, 2020.
- [18] M.-C. Danner, A. Robertson, V. Behrends, and J. Reiss, "Antibiotic pollution in surface fresh waters: Occurrence and effects," *Science of the total environment*, vol. 664, pp. 793–804, 2019.
- [19] S. S. Muthu, A. Khadir, and Muthu, *Novel materials for dye-containing wastewater treatment*. Springer, 2021.
- [20] K.-T. Chung, "Azo dyes and human health: A review," *Journal of Environmental Science and Health, Part C*, vol. 34, no. 4, pp. 233–261, 2016.
- [21] J. Feng, C. E. Cerniglia, and H. Chen, "Toxicological significance of azo dye metabolism by human intestinal microbiota," *Frontiers in bioscience (Elite edition)*, vol. 4, p. 568, 2012.
- [22] M. A. Rico-Mendez, R. Selvas, O. V. Kharissova, D. Toral-Acosta, N. P. Puente-Ramirez, R. Chapa-Garcia, and A. A. Gonzalez-Roque, "An efficient ph detector for water contamination based on mach-zehnder interferometer application," *Sci*, vol. 6, no. 4, p. 80, 2024.
- [23] O. V. Kharissova, G. A. Montano Gonzalez, S. C. Madrid Rodarte, M. Rico Mendez, and R. Selvas Aguilar, "Tapered optical fiber sensor coated with carbon nanotubes containing functional groups or fe nanoparticles for sensing applications," *Nano-Structures & Nano-Objects*, vol. 38, p. 101144, 2024.

- [24] K. S. Yee, “Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell’s equations in isotropic media,” *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 14, no. 3, pp. 302–307, 1966.
- [25] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House, 3rd ed., 2005.
- [26] A. F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos, and S. G. Johnson, “Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the fdtd method,” *Computer Physics Communications*, vol. 181, no. 3, pp. 687–702, 2010.
- [27] I. Ashry, Y. Mao, B. Wang, F. Hveding, A. Y. Bukhamsin, T. K. Ng, and B. S. Ooi, “A review of distributed fiber–optic sensing in the oil and gas industry,” *Journal of Lightwave Technology*, vol. 40, no. 5, pp. 1407–1431, 2022.
- [28] R. Hui and M. O’Sullivan, *Fiber-Optic Measurement Techniques*. Academic Press, 2022.
- [29] P. Lu, N. Lalam, M. Badar, B. Liu, B. T. Chorpening, M. P. Buric, and P. R. Ohodnicki, “Distributed optical fiber sensing: Review and perspective,” *Applied physics reviews*, vol. 6, no. 4, 2019.
- [30] S. Ertman, K. Rutkowska, and T. R. Woliński, “Recent progress in liquid-crystal optical fibers and their applications in photonics,” *Journal of Lightwave Technology*, vol. 37, no. 11, pp. 2516–2526, 2018.
- [31] M. Elsherif, A. E. Salih, M. G. Muñoz, F. Alam, B. AlQattan, D. S. Antonysamy, M. F. Zaki, A. K. Yetisen, S. Park, T. D. Wilkinson, *et al.*, “Optical fiber sensors: Working principle, applications, and limitations,” *Advanced Photonics Research*, vol. 3, no. 11, p. 2100371, 2022.
- [32] W. Lin, Y. Liu, P. P. Shum, and L. Shao, “In-line mach zehnder interferometer based on ytterbium doped fiber with up-taper structure in fiber ring laser and its application in sensing,” *Sensors*, vol. 22, no. 23, 2022.

- [33] M. Herrera-Domínguez, G. Morales-Luna, J. Mahlkecht, Q. Cheng, I. Aguilar-Hernández, and N. Ornelas-Soto, “Optical biosensors and their applications for the detection of water pollutants,” *Biosensors*, vol. 13, no. 3, p. 370, 2023.
- [34] P. Hariharan, *Basics of interferometry*. Elsevier, 2010.
- [35] S. P. Kok, Y. I. Go, X. Wang, and M. D. Wong, “Advances in fiber bragg grating (fbg) sensing: A review of conventional and new approaches and novel sensing materials in harsh and emerging industrial sensing,” *IEEE Sensors Journal*, vol. 24, no. 19, pp. 29485–29505, 2024.
- [36] A. S. Alkorbi, J. Wekalao, S. K. Patel, N. Na, M. Jalalah, F. A. Harraz, and A. H. Almagani, “Design and analysis of a graphene/gold nanostructure metasurface surface plasmon resonance sensor for biomedical applications,” *Plasmonics*, vol. 20, no. 6, pp. 3573–3582, 2025.
- [37] B. Zha, Z. Wang, L. Ma, J. Chen, H. Wang, X. Li, S. Kumar, and R. Min, “Intelligent wearable photonic sensing system for remote healthcare monitoring using stretchable elastomer optical fiber,” *IEEE Internet of Things Journal*, vol. 11, no. 10, pp. 17317–17329, 2024.
- [38] X. Wen, T. Ning, Y. Bai, C. Li, J. Li, and C. Zhang, “Ultrasensitive temperature fiber sensor based on fabry-pérot interferometer assisted with iron v-groove,” *Optics express*, vol. 23, no. 9, pp. 11526–11536, 2015.
- [39] H. Paz-Penagos, S. X. Campagnoli-Martínez, J. C. Gómez-Rubiano, and J. S. Currea, “Modelo teórico de sensor basado en el principio de la reflectometría de luz sobre fibra óptica para detección de sobrecarga vehicular,” *Información tecnológica*, vol. 30, no. 2, pp. 275–282, 2019.
- [40] M. A. Butt, G. S. Voronkov, E. P. Grakhova, R. V. Kutluyarov, N. L. Kazanskiy, and S. N. Khonina, “Environmental monitoring: A comprehensive review on optical waveguide and fiber-based sensors,” *Biosensors*, vol. 12, no. 11, p. 1038, 2022.

- [41] S. Botewad, V. Paturkar, and G. Muley, "Fabrication and evaluation of evanescent wave absorption based polyaniline-cladding modified fiber optic urea biosensor," *Optical Fiber Technology*, vol. 40, pp. 8–12, 2018.
- [42] L. Jiao, N. Zhong, X. Zhao, S. Ma, X. Fu, and D. Dong, "Recent advances in fiber-optic evanescent wave sensors for monitoring organic and inorganic pollutants in water," *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, vol. 127, p. 115892, 2020.
- [43] S. Moreno, D. Torres, and G. P. Leguizamón, "Análisis y comparativo de los amplificadores ópticos soa, edfa y raman," *Ingeniería Investigación y Desarrollo: I2+ D*, vol. 18, no. 2, pp. 22–28, 2018.
- [44] M. Ding and G. Brambilla, "Optical fibres and sensors for biomedical applications," in *Biophotonics for Medical Applications*, pp. 53–78, Elsevier, 2015.
- [45] F. B. de Sousa, F. M. de Sousa, J. E. de Oliveira, L. A. de Oliveira, F. P. da Luz, J. M. Oliveira, M. B. C. Costa, W. Paschoal, C. A. B. da Silva Junior, and M. B. C. Costa, "Numerical analysis of the hybrid photonic crystal fiber and single mode fiber/fiber bragg grating sensor for simultaneous measurement of temperature and strain," *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, vol. 16, no. 2, pp. 329–334, 2019.
- [46] Y. Zhao, H. Zhao, R.-q. Lv, and J. Zhao, "Review of optical fiber mach–zehnder interferometers with micro-cavity fabricated by femtosecond laser and sensing applications," *Optics and Lasers in Engineering*, vol. 117, pp. 7–20, 2019.
- [47] S. Ge, S. Zheng, X. Zhang, X. Jin, and H. Chi, "A microwave photonic scheme for improving the sensitivity of mach-zehnder optical fiber interferometer sensor," in *2011 International Topical Meeting on Microwave Photonics jointly held with the 2011 Asia-Pacific Microwave Photonics Conference*, pp. 222–225, IEEE, 2011.
- [48] Y. Cao, H. Liu, Z. Tong, and S. Yuan, "Simultaneous measurement of temperature and microdisplacement based on a mach–zehnder interferometer cascaded with a fiber bragg grating," *Optical Engineering*, vol. 54, no. 6, pp. 066101–066101, 2015.

- [49] Y. Zhao, F. Xia, M.-q. Chen, and R.-q. Lv, "Optical fiber low-frequency vibration sensor based on butterfly-shape mach-zehnder interferometer," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 273, pp. 107–112, 2018.
- [50] J. Gong, C. Shen, Y. Xiao, S. Liu, C. Zhang, Z. Ding, H. Deng, J. Fang, T. Lang, C. Zhao, *et al.*, "High sensitivity fiber temperature sensor based pdms film on mach-zehnder interferometer," *Optical Fiber Technology*, vol. 53, p. 102029, 2019.
- [51] Z. Chenari, H. Latifi, S. Ghamari, R. Hashemi, and F. Doroodmand, "Adiabatic tapered optical fiber fabrication in two step etching," *Optics & Laser Technology*, vol. 76, pp. 91–95, 2016.
- [52] H. Karimi-Alavijeh, A. Taslimi, M. H. Maghsoudian, M. H. Poorghadiri, and M. Kazemzadeh, "Fabrication of low-loss adiabatic optical microfibers using an attainable arc-discharge fiber tapering setup," *Optics Communications*, vol. 522, p. 128669, 2022.
- [53] M. T. Byrne and Y. K. Gunko, "Recent advances in research on carbon nanotube–polymer composites," *Advanced Materials*, vol. 22, pp. 1672–1688, 2010.
- [54] P. Zhao, L. Wang, J. Luo, J. Li, and C. Pan, "Determination of pesticide residues in complex matrices using multi-walled carbon nanotubes as reversed-dispersive solid-phase extraction sorbent," *Journal of Separation Science*, vol. 35, pp. 153–158, 2011.
- [55] S. Wang, C. W. Ng, W. Wang, Q. Li, and Z. Hao, "Synergistic and competitive adsorption of organic dyes on multiwalled carbon nanotubes," *Chemical Engineering Journal*, vol. 197, pp. 34–40, 2012.
- [56] M. Shirmardi, A. Mesdaghinia, A. H. Mahvi, S. Nasser, and R. Nabizadeh, "Kinetics and equilibrium studies on adsorption of acid red 18 (azo-dye) using multiwall carbon nanotubes (mwcnts) from aqueous solution," *Journal of Chemistry*, vol. 9, pp. 2371–2383, 2011.

- [57] A. Hashem, C. O. Aniagor, O. M. Morsy, S. Farag, and A. Aly, “Adsorptive removal of acid blue 193 dye from wastewater using citrullus colocynthis biomass,” *Biomass Conversion and Biorefinery*, vol. 15, pp. 7105–7117, 2024.
- [58] M. Liugè and D. Paliulis, “Treatment of water containing dyes using cellulose aerogels,” *Environmental and Climate Technologies*, vol. 27, pp. 314–322, 2023.
- [59] M. Wawrzkievicz and Z. Hubicki, “Anion exchange resins as effective sorbents for removal of acid, reactive, and direct dyes from textile wastewaters,” *Ion Exchange - Studies and Applications*, 2015.
- [60] P. P. Mon, P. P. Cho, H. S. Rangappa, S. Dobhal, P. Ghosal, G. Madras, and C. Subrahmanyan, “Highly porous multiwalled carbon nanotube-foam composite for batch adsorption performances of dyes,” *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 128, pp. 8223–8237, 2024.
- [61] S. Wang, C. W. Ng, W. Wang, Q. Li, and Z. Hao, “Synergistic and competitive adsorption of organic dyes on multiwalled carbon nanotubes,” *Chemical engineering journal*, vol. 197, pp. 34–40, 2012.
- [62] A. M. Alswieleh, “Zwitterionic polymer brushes coated with mesoporous silica nanoparticles as efficient adsorbents for dye removal from aqueous solutions,” *ACS Applied Polymer Materials*, vol. 5, pp. 1334–1343, 2023.
- [63] M. Ghoochian, “Adsorption of nile blue a from wastewater using magnetic multi-walled carbon nanotubes: kinetics and equilibrium studies,” *Iranian Journal of Toxicology*, vol. 10, pp. 7–12, 2016.
- [64] Natasha, A. Khan, U. U. Rahman, Sadaf, M. Yaseen, R. A. Abumousa, R. Khattak, N. Rehman, M. Bououdina, and M. Humayun, “Effective removal of nile blue dye from wastewater using silver-decorated reduced graphene oxide,” *ACS omega*, vol. 9, no. 17, pp. 19461–19480, 2024.

- [65] H. Huang, J. Yu, W. Liu, and X. Jiang, “Amino-functionalized multi-walled carbon nanotubes as novel adsorbents for selective adsorption of anionic dyes in aqueous solution,” *Nano*, vol. 10, p. 1550065, 2015.
- [66] C. C. Han, J. Wang, and L. Ding, “An improved z-transform finite difference time domain method for electromagnetic scattering and plasma stealth,” *IEEE Access*, vol. 12, pp. 72983–72989, 2024.
- [67] U. S. Inan and R. A. Marshall, *Numerical electromagnetics: the FDTD method*. Cambridge University Press, 2011.
- [68] B. Yang and C. A. Balanis, “Divergence properties of the nonstandard finite difference methods,” *IEEE microwave and wireless components letters*, vol. 17, no. 2, pp. 88–90, 2007.
- [69] B. Yang and C. A. Balanis, “An isotropy-improved nonstandard finite-difference time-domain method,” *IEEE transactions on antennas and propagation*, vol. 54, no. 7, pp. 1935–1942, 2006.
- [70] E. Meier, V. Lukin, and U. Shumlak, “Spectral element spatial discretization error in solving highly anisotropic heat conduction equation,” *Computer Physics Communications*, vol. 181, no. 5, pp. 837–841, 2010.
- [71] J. Liu, M. Brio, and J. V. Moloney, “An overlapping yee finite-difference time-domain method for material interfaces between anisotropic dielectrics and general dispersive or perfect electric conductor media,” *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*, vol. 27, pp. 22–33, 2013.
- [72] E. L. Tan, “Fundamental schemes for efficient unconditionally stable implicit finite-difference time-domain methods,” *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 56, no. 1, pp. 170–177, 2008.

- [73] F. Teixeira, C. Sarris, Y. Zhang, D.-Y. Na, J.-P. Berenger, Y. Su, M. Okoniewski, W. Chew, V. Backman, and J. J. Simpson, “Finite-difference time-domain methods,” *Nature Reviews Methods Primers*, vol. 3, no. 1, p. 75, 2023.
- [74] J. Cho, M. Park, and K. Jung, “Numerical accuracy of finite-difference time-domain formulations for magnetized plasma,” *Journal of Electromagnetic Engineering and Science*, vol. 22, pp. 195–201, 2022.
- [75] D. M. Sullivan, *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method*. IEEE/Wiley, 2nd ed., 2013.
- [76] J. Bérenger, “A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves,” *Journal of Computational Physics*, vol. 114, no. 2, pp. 185–200, 1994.
- [77] X. Wang, G. Niedermayer, G. Lin, P. Lu, B. Wang, L. Chen, and X. Bao, “Polarization-maintaining property of tapered polarization-maintaining fibers,” *Applied Optics*, vol. 52, no. 8, pp. 1550–1554, 2013.
- [78] Z. Li, X. S. Yao, X. Chen, H. Chen, Z. Meng, and T. Liu, “Complete characterization of polarization-maintaining fibers using distributed polarization analysis,” *Journal of light-wave technology*, vol. 33, no. 2, pp. 372–380, 2015.
- [79] T. M. H. Le, “A study on the effects of potassium permanganate on the functionalization of multi-walled carbon nanotubes,” *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, vol. 11, no. 11, p. 111004, 2022.
- [80] Z. Huang, Y. Ma, W. Jing, Y. Zhang, X. Jia, Q. Cai, Q. Ao, and X. Yang, “Tracing carbon nanotubes (cnts) in rat peripheral nerve regenerated with conductive conduits composed of poly (lactide-co-glycolide) and fluorescent cnts,” *ACS Biomaterials Science & Engineering*, vol. 6, no. 11, pp. 6344–6355, 2020.
- [81] A. Tomova, G. Gentile, A. Grozdanov, M. Errico, P. Paunović, M. Avella, and A. Dimitrov, “Functionalization and characterization of mwcnt produced by different methods,” *Acta Physica Polonica A*, vol. 129, no. 3, pp. 405–408, 2016.

- [82] R. Awal, M. Al-Mamun, N. Jewena, J. I. Khandaker, N. Y. Tanisa, S. Ahmed, F. Shahriar, and M. M. Haque, “Upcycling prawn shells: Chitosan–carbon nanotube nanocomposites with boosted magnetic and electrical properties,” *Micro & Nano Letters*, vol. 19, no. 3, p. e12197, 2024.
- [83] R. Afshari, S. Mazinani, and M. Abdouss, “Nanohybrid nanoparticles based on chitosan/-functionalized carbon nanotubes as anti-hiv nanocarrier,” *Nano*, vol. 10, no. 01, p. 1550010, 2015.
- [84] K. Korgaonkar, N. P. Agadi, and J. Seetharamappa, “Porous zinc oxide and functionalized multiwalled carbon nanotubes composite as electrode material for enhanced electrochemical sensing of an anticancer drug, dasatinib,” *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 171, no. 3, p. 037521, 2024.