



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Modelado teórico-numérico de la respuesta plasmónica y presión por radiación en nanopartículas metálicas porosas

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA

por

Alejandro Ojeda Xiqui

Asesorado por

Dra. Ana Lilia González Ronquillo

Dr. Miller Toledo Solano

Puebla Pue.
Julio de 2024



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Modelado teórico-numérico de la respuesta plasmónica y
presión por radiación en nanopartículas metálicas porosas

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA

por

Alejandro Ojeda Xiqui

Asesorado por

Dra. Ana Lilia González Ronquillo

Dr. Miller Toledo Solano

Puebla Pue.
Julio de 2024

Título: Modelado teórico-numérico de la respuesta plasmónica y presión por radiación en nanopartículas metálicas porosas

Estudiante: ALEJANDRO OJEDA XIQUI

COMITÉ

Dr. Víctor Manuel Altuzar Aguilar
Presidente

Dr. Martín Rodolfo Palomino
Secretario

Dr. Jesús Andrés Arzola Flores
Vocal

Dr. José Juan Gervacio Arciniega
Vocal

Dra. Ana Lilia González Ronquillo
Asesora

Dr. Miller Toledo Solano
Co-asesor

Agradecimientos

Al alcanzar este punto y culminar esta etapa, reconozco que es un logro que no hubiera sido posible sin todas las personas que me rodearon y aportaron de diversas maneras a mi vida.

El agradecimiento completo a mi familia, mi padre, Alejandro que me enseñó que la sabiduría e inteligencia tienen que ir de la mano; a mi madre, Carmen cuyo amor, dedicación y todo el ser que es, me dan la inspiración de siempre buscar y ser más. A mi hermano, Rogelio que me enseñó a crecer viendo que las soluciones se deben tomar con calma y felicidad. A mi demás familia, tíos, tías primos y primas.

La culminación de esta etapa dedicada especialmente a mis abuelos maternos y abuela paterna, espero que me sigan viendo crecer.

A Mitzy que me da la seguridad, amor y comprensión, los cuales me han hecho vivir los mejores años de mi vida y en gran parte la razón por la cual veo el mundo de una forma diferente y especial. Gracias por todos los momentos compartidos, por creer siempre en mí y sobre todo por impulsarme a ser mejor día con día.

A mis mejores amigos, Gerardo, Mariana, Omar y Pani, de quienes aprendí el valor del trabajo en equipo y que siempre se pueden mejorar las cosas. Un agradecimiento especial a Gerardo por ser el hermano mayor que nunca tuve.

A mis profesores, quienes me brindaron conocimientos más allá de lo que imaginé y siempre dieron lo mejor de sí, incluso fuera del aula.

Agradezco profundamente a mi jurado, el Dr. Víctor Manuel Altuzar Aguilar, el Dr. Martín Rodolfo Palomino, el Dr. Jesús Andrés Arzola Flores y el Dr. José Juan Gervacio Arciniega, por su valiosa retroalimentación.

Agradezco a la Dra. Ana Lilia González Ronquillo, sin la cual este trabajo no habría sido posible, su paciencia, asesoría y dedicación en cada aspecto fueron fundamentales. De igual forma el agradecimiento al Dr. Miller Toledo Solano, el cual brindó su confianza y tiempo en todo momento para hacer posible el proyecto.

A todos ustedes, muchas gracias.

Índice general

Resumen	XVII
Introducción	XIX
1. Marco teórico	1
1.1. Antecedentes	1
1.1.1. Trabajos previos	1
1.2. Consideraciones teóricas	3
1.3. Justificación	3
1.3.1. Propósito	3
1.3.2. Motivación	3
2. Hipótesis	9
3. Objetivos	11
3.1. Objetivo General	11
3.2. Objetivos Específicos	11
4. Parte teórica	13
4.1. Clasificación de poros	13
4.2. Absorción, dispersión y extinción	15
4.3. Presión por radiación	16
4.4. Campo eléctrico	18
4.4.1. Campo eléctrico de una distribución de cargas	18
4.5. Plasmones de superficie localizados	20
4.5.1. Plasmones para distintas morfologías	21
4.6. Efectos de tamaño y morfología	23
5. Metodología	25
5.1. Modelado de la forma y tamaño de los poros	25
5.2. DDSCAT	25
5.3. Forma y distribución de poros en la NP	28
5.4. Código computacional para crear el arreglo de dipolos de una NP porosa	30
5.5. Programa computacional generado	31
5.5.1. Figura	32
5.5.2. Marcar coincidencias	32
5.5.3. Poros	33
5.5.4. Gráficar	34
5.5.5. Conteo	34
5.5.6. Archivo	36
5.5.7. Método concreto: Creación	36

5.5.8. Implementación	37
5.6. Implementación de DDSCAT para simulaciones de NPs porosas	37
6. Resultados	39
6.1. Simulaciones de NPs Sólidas y Porosas	39
6.1.1. Esferas porosas	40
6.1.2. Cubos porosos	41
6.2. Eficiencias ópticas	42
6.2.1. NPs esféricas con porosidad cilíndrica y esférica	42
6.2.2. NPs cúbicas con porosidad cilíndrica	55
6.3. Presión por radiación	65
6.3.1. NPs esféricas con porosidad cilíndrica y esférica	65
6.3.2. NPs cúbicas con porosidad cilíndrica	71
6.4. Campo cercano	77
6.4.1. NPs esféricas con porosidad cilíndrica	77
6.4.2. NPs cúbicas con porosidad cilíndrica	82
Conclusiones	87
6.5. Eficiencias ópticas	87
6.6. Presión por radiación	87
6.7. Campo cercano	88
6.8. Trabajos futuros	88
A. Figura	89
A.1. Esfera	89
A.2. Cubo	90
B. ddscat.par	91
C. shape.dat	93
D. Código para la extracción de resultados de presión por radiación	95
Bibliografía	97

Índice de figuras

1.1. Distribución de Au en una NP porosa de Au revestida de Titanio a 350° por 1 h. Sección transversal preparada por FIB ¹ y tomada por TEMEDS ² (Juhász et al., 2020, Fig 1 b), p.4) [8]	4
1.2. Micrografía HRSEM ³ de NP de oro porosa en sustrato de SiO ₂ /Si (Kosinova et al., 2017, Fig 1 a)) [9].	5
1.3. (Jiang et al., 2018, Figura 1, Figura 2 p. 3) [5].	5
1.4. Espectro de absorción de nanopartículas de oro porosas de diferentes tamaños de diámetro (Qing et al., 2021, Figura 1 i) p. 2) [3].	6
1.5. Aumento del campo electromagnético de nanorods de oro. a) Prisma pentagonal, b) prisma cuadrado con un truncamiento de 1/5, c) prisma cuadrado con un truncamiento de 1/3, y d) prolato. Las figuras no primadas corresponden al vacío y las primadas al agua como medio circundante. El campo incidente tiene un vector de onda perpendicular al plano YZ y una polarización a lo largo del eje Z (Noguez et al., 2014, Figura 11, p. 11) [10].	7
4.1. Esquema de la clasificación de poros, de acuerdo a su forma geométrica y accesibilidad (Sarna-Boś et al, 2021, fig 1 [13]). Del lado izquierdo se muestran las formas de los poros, iniciando con poros cilíndricos, después poros en forma de botella, poros en forma de rendija y poros en forma de conos o embudos. En el lado derecho se muestran de color verde los poros sin salida y de amarillo los poros que atraviesan, ambos siendo poros abierto y de color naranja los poros cerrados.	14
4.2. Onda EM plana polarizada en dirección \hat{x} y viajando en dirección \hat{z} , $\hat{\mathbf{E}} = \hat{x}$ Y $\hat{\mathbf{B}} = \hat{y}$ (Griffiths, 2017, fig. 9.10, p. 397).	16
4.3. \mathbf{S} en un Δt , una longitud $c\Delta t$ que atraviesa un área A (Griffiths, 2017, fig. 9.12, p. 399).	17
4.4. Absorción y dispersión de NP esféricas de plata en función del radio (González, 2007, Figura 2.7, p. 20) [18].	22
4.5. Eficiencia de absorción (Q_{abs}) de NP cúbicas de plata para diferentes tamaños (Noguez, 2005, Fig. 2 p. 3) [16].	22
4.6. Absorción y dispersión de NP esféricas de oro en función del radio (González, 2007, Figura A.2, p. 119) [18].	24
4.7. Absorción y dispersión de NP esféricas de cobre en función del radio (González, Figura A.2, p. 119) [18].	24
5.1. Esquema gráfico de la representación de una NP en forma de esfera y cubo con poros abiertos de forma cilíndrica; a) Esfera vista superior; b) Vista lateral de la esfera donde atraviesan los poros; c) Cubo vista superior; d) Vista lateral del cubo donde atraviesan los poros.	29
5.2. Distribución de los poros en la nanopartícula donde tiene un poro central y los demás poros están distribuidos en anillos concéntricos al poro central.	29

5.3. Representación del cálculo del volumen de la NP por esferas dentro de la morfología de tamaño conocido. En a) se denota el cálculo con esferas de tamaño considerable mientras que en b) se demuestra que entre más pequeñas las esferas es más refinado el cálculo.	35
5.4. Diagrama de la metodología que muestra la relación del programa escrito en Python con su uso en DDSCAT.	38
6.1. Esfera y cubo sólido discretizadas por dipolos puntuales.	40
6.2. NPs esféricas discretizadas por dipolos puntuales con poros cilíndricos con distribución radial, a la izquierda se tienen 29 poros y a la derecha 45 poros.	40
6.3. NPs esféricas discretizadas por dipolos puntuales con poros esféricos con distribución aleatoria, a la izquierda se tienen 29 poros y a la derecha 80 poros.	40
6.4. NPs cúbicas discretizadas por dipolos puntuales con poros cilíndricos con distribución radial, a la izquierda se tienen 29 poros y a la derecha 45 poros.	41
6.5. Polarización de la onda EM al incidir en la NP	42
6.6. Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en la esfera varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio de la esfera es el aire.	43
6.7. Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en la esfera varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio de la esfera es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.	44
6.8. Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. La esfera tiene 45 poros y esta inmersa en diferentes medios así como diferentes rellenos de poro. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. Las esferas con (sin) etiqueta adicional H_2O representa a las esferas con los poros rellenos de agua (aire) y medio el aire, con la etiqueta H_2O/H_2O son las esferas con agua como medio y relleno de poro.	45
6.9. Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 13 a 80. El medio de la esfera es el aire al igual que el relleno de los poros.	46
6.10. Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 29 a 80. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización en dirección \hat{y} (\hat{z}) a los poros. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de agua.	47
6.11. Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 29 a 80. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización en dirección \hat{y} (\hat{z}) a los poros. El medio de la esfera es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.	48
6.12. Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en la esfera varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio de la esfera es el aire.	49
6.13. Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en la esfera varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio de la esfera es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.	50

6.14. Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. La esfera tiene 45 poros y esta inmersa en diferentes medios así como diferentes rellenos de poro. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. Las esferas con (sin) etiqueta adicional H_2O representa a las esferas con los poros rellenos de agua (aire) y medio el aire, con la etiqueta H_2O/H_2O son las esferas con agua como medio y relleno de poro.	51
6.15. Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 29 a 80. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización en dirección \hat{y} (\hat{z}) a los poros. El medio de la esfera es el aire.	52
6.16. Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 29 a 80. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización en dirección \hat{y} (\hat{z}) a los poros. El medio de la esfera es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.	54
6.17. Cubo de oro de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en el cubo varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio del cubo es el aire.	55
6.18. Cubo de oro de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en el cubo varía de 29 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio del cubo es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.	57
6.19. Cubos de oro de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El cubo tiene 45 poros y esta inmerso en diferentes medios así como diferentes rellenos de poro. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. Los cubos con (sin) etiqueta adicional H_2O representa a los cubos con los poros rellenos de agua (aire) y medio el aire, con la etiqueta H_2O/H_2O son los cubos con agua como medio y relleno de poro.	58
6.20. Cubo de plata de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en el cubo varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio del cubo es el aire.	60
6.21. Cubo de plata de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en el cubo varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio del cubo es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.	62
6.22. Cubos de plata de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El cubo tiene 45 poros y esta inmerso en diferentes medios así como diferentes rellenos de poro. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. Los cubos con (sin) etiqueta adicional H_2O representa a los cubos con los poros rellenos de agua (aire) y medio el aire, con la etiqueta H_2O/H_2O son los cubos con agua como medio y relleno de poro.	63
6.23. Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.	65

- 6.24. Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 66
- 6.25. Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 67
- 6.26. Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el agua y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 67
- 6.27. Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el agua y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 68
- 6.28. Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el agua y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 69
- 6.29. Esferas de plata con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire así como el relleno de los poros, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 70
- 6.30. Esferas de plata con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire así como el relleno de los poros, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 70
- 6.31. Cubos de oro de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 5, 29 y 45 poros. El cubo con 13 poros, sus poros tienen forma cilíndrica de $r = 6$ nm. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 71
- 6.32. Cubos de oro de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 5, 29 y 45 poros. El cubo con 13 poros, sus poros tienen forma cilíndrica de $r = 6$ nm. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm. 72

6.33. Cubos de oro de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 29 y 45 poros. El cubo con 13 poros, sus poros tienen forma cilíndrica de $r = 6$ nm. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.	73
6.34. Cubos de oro de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 29 y 45 poros. El cubo con 13 poros, sus poros tienen forma cilíndrica de $r = 6$ nm. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.	74
6.35. Cubos de plata de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 5 y 45 poros. Los poros de forma cilíndrica de $r = 6$ nm son para los cubos con 5 y 13 poros. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.	75
6.36. Cubos de plata de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 29 y 45 poros. Los poros de forma cilíndrica de $r = 6$ nm son para el cubo con 13 poros. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.	76
6.37. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de oro. a) Representa una esfera sólida con medio el aire y b) Representa una esfera sólida con medio el agua.	77
6.38. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de oro con 45 poros. Los anillos translúcidos blancos en ellas marcan la posición de los poros. a) Representa una esfera con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa una esfera con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa una esfera con medio el agua y poros rellenos de agua.	78
6.39. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de oro con 45 poros, se realizó un corte transversal en la NP de manera que se observa dentro de la esfera. Las franjas translúcidas blancas remarcan la posición de los poros. a) Representa la sección transversal de una esfera con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa la sección transversal de una esfera con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa la sección transversal de una esfera con medio el agua y poros rellenos de agua.	79
6.40. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de plata. a) Representa una esfera sólida con medio el aire y b) Representa una esfera sólida con medio el agua.	80
6.41. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de plata con 45 poros. Los anillos translúcidos blancos en ellas marcan la posición de los poros. a) Representa una esfera con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa una esfera con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa una esfera con medio el agua y poros rellenos de agua.	80
6.42. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de plata con 45 poros, se realizó un corte transversal en la NP de manera que se observa dentro de la esfera. Las franjas translúcidas blancas remarcan la posición de los poros. a) Representa la sección transversal de una esfera con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa la sección transversal de una esfera con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa la sección transversal de una esfera con medio el agua y poros rellenos de agua.	81
6.43. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de oro. a) Representa un cubo sólido con medio el aire y b) Representa un cubo sólido con medio el agua.	82

6.44. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de oro con 45 poros. Los anillos translúcidos blancos en ellas marcan la posición de los poros. a) Representa un cubo con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa un cubo con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua.	82
6.45. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de oro con 45 poros, se realizó un corte transversal en la NP de manera que se observa dentro del cubo. Las franjas translúcidas blancas remarcan la posición de los poros. a) Representa la sección transversal de un cubo con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa la sección transversal de un cubo con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa la sección transversal de un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua.	83
6.46. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de plata. a) Representa un cubo sólido con medio el aire y b) Representa un cubo sólido con medio el agua.	84
6.47. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de plata con 45 poros. Los anillos translúcidos blancos en ellas marcan la posición de los poros. a) Representa un cubo con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa un cubo con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua.	85
6.48. Representación tridimensional de la intensidad $ E $ en NPs de plata con 45 poros, se realizó un corte transversal en la NP de manera que se observa dentro del cubo. Las franjas translúcidas blancas remarcan la posición de los poros. a) Representa la sección transversal de un cubo con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa la sección transversal de un cubo con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa la sección transversal de un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua.	86

Índice de tablas

4.1. Clasificación de los poros según la anchura de poro [12].	13
4.2. Tipo de poros en nm, clasificación de poros basados en el ancho del poro y sus funciones desde macroporo hasta microporo [13].	14
4.3. Tipo de poros en nm, clasificación de poros basados en el ancho del poro y sus funciones desde supermicroporo hasta submicroporo [13].	15
6.1. NPs esféricas de radio 165 nm, porcentaje de volumen respecto al volumen de una NP sólida al tener poros cilíndricos de $r = 5$ nm distribuidos radialmente y con poros distribuidos aleatoriamente en la NP demarcados con subíndice a de $r = 41$ nm.	41
6.2. NPs cúbicas de lado 165 nm, porcentaje de volumen respecto al volumen de una NP sólida al tener poros cilíndricos de $r = 5$ nm distribuidos radialmente.	41

Resumen

Palabras clave: *Nanopartícula, Oro, Plata, Nanoesferas, Nanocubos, Eficiencias ópticas, Presión por radiación, Campo cercano.*

En este trabajo se reporta el estudio y simulación de nanopartículas (NPs) metálicas porosas con el objetivo de analizar sus propiedades ópticas, tales como sus eficiencias de extinción, absorción y dispersión; además de la presión por radiación ejercida por un campo electromagnético incidente. De igual forma se reporta la interacción de las NPs ante un campo eléctrico cercano, dentro y sobre la superficie de la NP. Todos estos resultados en función de distintas longitudes de onda.

Para la obtención de resultados se empleó el software DDSCAT para llevar a cabo las simulaciones mencionadas anteriormente, el cual se basa en el método de aproximación de dipolo discreto (DDA por sus siglas en inglés). Los parámetros estudiados de las NP porosas son el tamaño, distribución y número de poros. También se eligieron el Au y la Ag como materiales de la NP y medios materiales con diferente índice de refracción ocupando los poros, siendo el aire y agua. La elección de materiales y la variación de los parámetros permitieron obtener las características específicas de la respuesta plasmónica de las NPs porosas, su interacción con el campo y la fuerza ejercida en cada NP por una onda electromagnética.

Se realizó una comparación entre los resultados obtenidos para las NPs porosas y los datos correspondientes a NPs sólidas. Este análisis comparativo proporcionó información sobre las variaciones y cambios que experimentan las propiedades ópticas y de presión por radiación en las NPs al introducir la porosidad.

Los resultados obtenidos indican que las nanopartículas porosas y sólidas tienen eficiencias ópticas muy parecidas dependiendo del grado de porosidad, mientras que se observan cambios notables en el campo eléctrico debido a la morfología con poros y una respuesta de fuerza única e imperceptible ante la presión por radiación.

Introducción

A lo largo del último siglo, las nanopartículas (NPs) metálicas han tenido un gran interés debido a sus propiedades y múltiples aplicaciones en medicina, biología, química, física e ingeniería. El hecho de que sea un campo aún amplio por explorar da pie a múltiples interrogantes con respecto al tema.

El término *nano* proviene del griego, que significa "enano", y se utiliza en física como sufijo de 10^{-9} veces la unidad. Los nanomateriales, como indica el sufijo, son materiales que se encuentran en una escala entre los límites aproximados de 1 a 100 nanómetros, siendo, en algunos casos, mayor a este límite debido a los tamaños menores a 1 micrómetro de la escala. También se puede ubicar el tamaño de los nanomateriales entre una escala de las longitudes de onda del visible/ultravioleta y la radiación de rayos X [1].

Los nanomateriales se diferencian de los materiales en bulto en sus efectos térmicos, químicos, ópticos, eléctricos, magnéticos, mecánicos y cuánticos, debido a las diferentes condiciones de interacción entre los átomos o moléculas que los componen debido a su escala. Los nanomateriales cuentan con un mayor número de electrones en su superficie, contrario a lo que ocurre en los materiales en bulto. Lo anterior, afecta al número de átomos, los cuales influyen al nivel de energía y tienen efectos en la banda de energía [1].

De los nanomateriales se derivan las NPs, las cuales son partículas individuales en la escala nanométrica en sus tres dimensiones (longitud, anchura y altura). Las NPs tienen una forma o morfología variada, la cual queda determinada por el material que las compone, la síntesis o las condiciones en las que fueron sintetizadas. Algunas de estas morfologías incluyen NPs esféricas, cúbicas, rectangulares, nanotubos, nanorods, platos, pirámides, prismas regulares e irregulares, entre otras formas [1]. Para estos nanosistemas, el oro y la plata son materiales de interés, ya que presentan una gran diversidad de estas formas, aunque también se pueden encontrar en otros tipos de metales, materiales semiconductores, polímeros u otros compuestos como dióxido de silicio.

Dentro de las propiedades físicas de las NPs metálicas se encuentra un fenómeno llamado plasmón. Los plasmones son oscilaciones de electrones que se propagan en un conductor, de tal forma que hay una generación de un campo electromagnético debido a dichas oscilaciones. Al incidir una onda de cierta frecuencia se puede encontrar una resonancia que es característica de cada NP y muestra un campo electromagnético aumentado, de tal forma que dependiendo del tipo de conductor puede formar más fácilmente sus plasmones [15].

Además de que el oro y la plata son materiales que, en forma de NPs, presentan diversas morfologías, es importante recalcar que han tenido múltiples aplicaciones en el último siglo, especialmente en medicina, por ejemplo, en el estudio de la compatibilidad y absorción de proteínas con NPs de oro. En este estudio preparan NPs de oro por calentamiento mediante el procedimiento estándar de reducción de iones con oro en presencia de citrato donde obtienen NPs entre 10 y 100 nm de diámetro para seguidamente agregar células sanguíneas como glóbulos rojos, leucocitos o plaquetas y ver su interacción. En este estudio encontraron como resultados que la compatibilidad de la sangre con NPs de oro respaldan el uso para aplicaciones en la administración de fármacos,

administración de genes o como biosensores, donde se produce un contacto directo con la sangre ya que no se mostró activación ni agregación de células con NPs de oro [2].

Una particularidad de las NPs de oro y plata, además de que su material sean metales nobles, es que son de los nanomateriales más plasmónicos, de tal forma que muestran la formación de plasmones. Lo anterior les conlleva a poseer múltiples propiedades, como su actividad antimicrobiana, que detiene el crecimiento de microorganismos o los mata debido a sus estados de oxidación y su alta inercia química debido a ser metales nobles, su alta conductividad térmica y eléctrica, y sus destacadas propiedades ópticas por la presencia de plasmones de superficie localizados.

Por las propiedades mencionadas anteriormente, el estudio de las NPs de Au y Ag resultan especialmente interesantes. Analizar sus efectos en distintas circunstancias representa un avance significativo para sus posibles aplicaciones en diversas áreas. Comprender cómo se comportan ante una onda electromagnética de diferentes longitudes y como responden en diferentes condiciones permitirá optimizar su uso en medicina, electrónica, y otras industrias donde ya han demostrado ser esenciales por sus propiedades entre ellas sus propiedades ópticas.

En las última décadas, con los avances de la nanotecnología y la química en la síntesis de estas NPs, al analizar morfologías con agujeros, se encontró que estos corresponden a poros, siendo de esta manera posible obtener NPs porosas. Estas NPs son candidatas a diferentes aplicaciones como catalizadores para fármacos, aparatos fotónicos y terapia.

Debido a las propiedades presentadas por las NPs de plata y oro, surge la pregunta fundamental que nos planteamos en el presente trabajo: ¿cambia la respuesta óptica de una NP metálica porosa en comparación con su contraparte sólida? La respuesta a esta pregunta tendría implicaciones en medicina, óptica, electrónica, entre otras ramas, además de generar un interés innato en una estructura poco común.

Este trabajo esta dividido en 6 capítulos, siendo el primer capítulo el marco teórico donde se realizaron las investigaciones de las NPs porosas, se tomaron las consideraciones teóricas, las justificaciones del proyecto y sus propósitos. En el capítulo 2 se genera la hipótesis, en el capítulo 3 se tiene la parte teórica donde se toman los conceptos físicos relacionados al tema. En el capítulo 5 se plantea la metodología utilizada, el como se obtendrán los resultados y la forma de calcularlos, el capítulo 6 se muestran los resultados y se da una descripción de estos. Al final del capítulo 6 se plantean las conclusiones del trabajo. Después de las conclusiones se encuentran los apéndices que complementan lo planteado en el trabajo.

Capítulo 1

Marco teórico

1.1. Antecedentes

En el último siglo, el estudio y aplicación de NPs metálicas ha tenido un gran auge, esto por sus propiedades plasmónicas y su comportamiento en comparación con los materiales a escala macroscópica o en bulto. Este fenómeno ha encontrado aplicaciones significativas en campos como la óptica, medicina, química y electrónica.

A pesar de los avances realizados, el vasto campo de estudio de los nanomateriales sigue siendo de gran interés debido a la amplia variación de parámetros y las diversas aplicaciones que tienen.

Una de las morfologías recientemente estudiadas son las NPs porosas, las cuales se pueden definir como NPs con agujeros u hoyos en su morfología. De manera similar a las NPs sólidas, éstas también presentan diversas aplicaciones. Por ejemplo, en medicina son útiles por sus propiedades teranósticas para tumores sólidos cancerosos, su eficiencia bactericida y rápida acción para inducir un aumento de la señal Raman de diversos analitos [3–5, 8]. Otras aplicaciones consideran su implementación en supercapacitores [6]. La creciente atención hacia las NPs porosas ha impulsado investigaciones sobre métodos químicos para su preparación, destacando especialmente los metales como la plata y el oro [8].

Es de resaltar que las NPs porosas de oro y plata exhiben propiedades plasmónicas notables en el espectro visible. A diferencia de su presentación sólida, se desconoce mucho sobre el efecto de los poros en su respuesta plasmónica, así que es deseable un estudio que caracterice sus propiedades ópticas.

Las NPs metálicas porosas demandan de un estudio con diversas variaciones de parámetros, como el grado de porosidad, el tamaño y la distribución de los poros, la polarización y longitud de onda de la luz incidente, el material de los poros y la forma general de la NP, así como el material. Comprender cómo estos factores afectan las propiedades de las NPs porosas es esencial para desentrañar su potencial en distintos campos de la ciencia y la tecnología.

1.1.1. Trabajos previos

Si bien el comienzo de estudios de NPs metálicas porosas data desde 1920 cuando se prepararon catalizadores metálicos de alta superficie específica mediante la desaleación de aleaciones a base de Al en soluciones alcalinas [1]. Se tenía un problema en las NPs metálicas porosas con relación a sus poros, ya que no se tenían un control preciso en la generación de poros, por lo que se tenían morfologías con poros sin control y con distribución de poros heterogénea, los cuales no eran los más convenientes debido a la falta de control en la generación de poros, la imprecisión de la caracterización de sus propiedades y la poca certidumbre de obtener resultados similares al replicarlos.

Ahora con los nuevos avances científicos, la síntesis de NPs porosas tiene un mayor control en su morfología y precisión en la caracterización de propiedades, siendo así que por medio de reacciones químicas como desaleaciones o métodos de templado, es posible controlar el número de poros, tamaño de los poros, tamaño de la NP, su material, entre otras características.

Al día de hoy se pueden encontrar algunas menciones de NPs de oro y plata porosas, en distintos rubros de la ciencia, siendo algunos de estos sobre el estudio de sus propiedades antimicrobianas, sus propiedades de absorción y dispersión ante rayos X; y el cómo sintetizarlas, así como las especificaciones de la morfología porosa de las NPs. Muchas de las aplicaciones de este tipo de NPs van destinadas a su uso en la medicina, como por ejemplo, su actividad antibacteriana debido a efectos fototérmicos y fotodinámicos, donde se intenta mediante diferentes irradiaciones de láser en el infrarrojo cercano, aumentar la temperatura de las NPs con una alta eficiencia de conversión fototérmica del 50.6 % a 68.5 % y ver sus efectos debido a su absorción [3].

Chienwen Huang y colaboradores reportaron el uso de biomarcadores para la detección de cáncer mediante la técnica de Espectroscopia Raman Mejorada por la Superficie (Surface Enhanced Raman Spectroscopy, SERS por sus siglas). En este estudio, se obtuvieron nanoesferas porosas de oro huecas de 50 nm de núcleo y diámetro de las partículas de aproximadamente 100 nm, sintetizadas mediante el método de plantilla (bubble template synthesis method) y electrodeposición de soluciones de oro (Au sulfite electrodeposition solution). Estas NPs tienen aplicaciones "in vivo", donde al circular por el torrente sanguíneo, un cierto porcentaje se adhiere a tumores, permitiendo su detección por la señal Raman característica presentada por las NPs de oro. La morfología de las NPs sintetizadas permite una fuerte absorción y dispersión en el infrarrojo cercano debido a la resonancia de plasmón superficial del oro por lo que se tiene una detección de las NPs con una banda de resonancia de plasmón superficial distintivo [4].

De estos dos trabajos resulta que la aplicación en medicina de las NPs porosas es debido a las propiedades de los metales que componen a las mismas, sobre todo la interacción con ondas electromagnéticas como su absorción y dispersión tomando en cuenta la resonancia de plasmón superficial.

Aunque gran parte de los trabajos en NPs porosas de oro y plata esta enfocado en medicina, estas también se desenvuelven en otras áreas. Por ejemplo, se ha reportado el empleo de NPs para la detección de residuos de pesticidas en jugo de naranja comercial. En el se da el uso de NPs de plata porosas de un tamaño entre 20 y 400 nm sintetizadas por el método de plantilla suave y una reacción redox de nitrato de plata (AgNO_3), dodecilamina, y bromuro de dodeciltrimetilamonio, estas sustancias se mezclaron en con tolueno, la mezcla a temperatura ambiente durante 24 horas se puso bajo agitación magnética fuerte, de esto se obtuvieron morfologías de nanorods. Con estas NP aplicadas en el jugo y con el método de SERS se da la detección de rodamina 6G (la cual se encuentra en los pesticidas) determinando la concentración de pesticidas. Por lo tanto, las nanoestructuras porosas de Ag pueden utilizarse como sustratos mejoradores para uso en SERS para la monitorización in situ y la identificación dactilar de trazas de sustancias químicas nocivas en productos agrícolas y entornos [5].

Además esta lo reportado por Necmiye Bahar y Duygu Ekinici en el uso de NPs de oro porosas envueltas en oxido de grafeno reducido para supercapacitores, de las que investigaron sus características electroquímicas como materiales catódicos y anódicos. Las NPs estudiadas fueron sintetizadas por el método de plantilla sintetizandolas combinando AgNO_3 y HAuCl_4 (ácido tetracloroaurico), de las cuales se le agrega hidroquinona ($\text{C}_6\text{H}_4 - 1,4 - (\text{OH})_2$) para controlar el tamaño, siendo dependientes de la concentración. Sintetizaron NPs de forma esférica y con tamaños entre 200 y 400 nm de diámetro. Se mostró que estas NPs son un material de electrodo más prometedor que las estructuras clásicas basadas en NPs de oro/grafeno para supercapacitores, es decir, que al tener poros tienen una respuesta diferente en comparación de su forma sólida [6].

El uso de este tipo de NPs está tomando un gran auge en la actualidad debido a los avances tecnológicos en su síntesis. Hoy en día, es posible tener un mayor control sobre la morfología, tamaño y material de las NPs a tal punto de igual forma generar poros de un tamaño deseado y realizar estudios más detallados. Estos avances permiten optimizar sus propiedades y aplicaciones,

haciendo que las NPs porosas sean aún más valiosas en diversas áreas, especialmente en la medicina y la electrónica.

1.2. Consideraciones teóricas

Aunque existen estudios sobre NPs de oro y plata porosas, es de recalcar, que estas investigaciones en este tema son escasas. Es decir, la cantidad de artículos específicos que abordan estudios sobre estas nanoestructuras porosas no es amplia, sin embargo, los estudios existentes están muy bien respaldados y se han obtenido resultados prometedores. En estos trabajos como las propiedades antibacteriales de nanocompositos de oro porosos de Qing Wu y colaboradores [3] o la síntesis directa de nanopartículas metálicas con porosidad regulable de Eric Detsi [7], se han identificado aplicaciones de interés como su uso en la medicina, electrónica y óptica [3, 4, 6] y métodos óptimos de síntesis para estas NPs como el método de plantilla o desaleaciones [1]. Es relevante mencionar que este tipo de nanoestructuras no es un tema nuevo, ya que ha sido planteado desde el siglo pasado pero imposible de estudiar debido a las limitaciones tecnológicas con los instrumentos para caracterizarlas.

La posible falta de investigaciones podría deberse a las características particulares de la síntesis de estas NPs. Es importante señalar que los avances en química, instrumentación y simulaciones teóricas han experimentado un progreso significativo en los últimos años. Este avance ha posibilitado la caracterización más certera de las NPs. Siendo de esta manera que se posibilita la replicación de experimentos ante sus características. Por ello es importante mostrar que el tema está experimentando un crecimiento, esto plantea una oportunidad para contribuir al campo y establecer una pequeña parte para una base sólida para explorar la viabilidad y potencial de estas nanoestructuras determinando ya sea sus propiedades ópticas como su absorción, dispersión y extinción, su interacción del campo eléctrico al incidir una onda electromagnética o la fuerza ejercida por la presión por radiación.

1.3. Justificación

1.3.1. Propósito

El propósito de este trabajo es estudiar, determinar, analizar y predecir las eficiencias ópticas, la interacción del campo eléctrico y la fuerza provocada por la presión de radiación ante diferentes ondas electromagnética de las NPs porosas de oro y plata (Au y Ag). Estas características son variadas e interesantes, ya que pueden conducir a múltiples aplicaciones o describir un posible comportamiento. Además, se estudia la forma de simular estas nanoestructuras con distintas características, como el tamaño del poro, el número de poros, la posibilidad de poros rellenos o vacíos, el comportamiento ante el cambio de material y su reacción ante distintas situaciones, así como su forma, entre otras. Para ello, se utilizarán múltiples herramientas computacionales, incluyendo programas, lenguajes de programación y cálculos complejos.

Otro propósito fue el realizar una comparación entre NPs de oro y plata, tanto porosas como sólidas, para observar cuánto varían sus características, ya sea en la respuesta de las eficiencias ópticas de absorción y dispersión e interacción con el campo cercano, además del efecto de presión por radiación comparando ambos casos. Esto permitirá identificar posibles cambios y sus repercusiones al tener NPs porosas. Encontrar diferencias y/o similitudes ayudará a destacar comportamientos importantes entre ellas.

1.3.2. Motivación

Para definir los parámetros y características de las NPs a simular como el tamaño de NP o el tamaño de poros, se necesita tener una base la cual es a través de trabajos previos experimentales del

tema. Estos trabajos experimentales sobre NPs porosas deben ser explícitos con las características de sus NPs sintetizadas, es decir, deben contener principalmente que se haya reportado un tamaño de la NP y el tamaño del poro. Para obtener estos datos de fuentes confiables se optó por la búsqueda en artículos científicos relacionados al tema.

Lo reportado por Juhász, L. y colaboradores obtuvieron que en la síntesis de NPs porosas, se estimó un tamaño promedio de 330 nm para la NP y un tamaño promedio de poro entre 10 y 20 nm. Esta síntesis en primera estancia se realiza para la NP sólida la cual es fabricada por la técnica de *solid-state dewetting* siendo una aleación de Au-Ag, seguidamente para la porosidad se aplica ácido nítrico para atacar a la plata y de esta manera obtener una NP porosa de oro. Cabe mencionar que estas NPs de oro además de tener poros, son recubiertas con una película delgada de titanio, pero antes de aplicar dicho recubrimiento se caracterizaron las NP de oro porosas, siendo reportados su tamaño y morfología como se muestra la figura 1.1 [8].

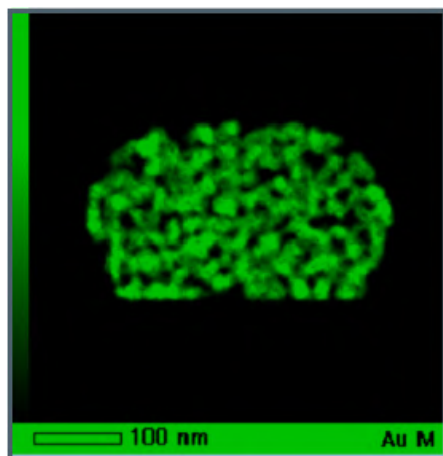


Figura 1.1: Distribución de Au en una NP porosa de Au revestida de Titanio a 350° por 1 h. Sección transversal preparada por FIB¹ y tomada por TEMEDS² (Juhász et al., 2020, Fig 1 b), p.4) [8]

De acuerdo con Kosinova A. y colaboradores mencionan una preparación de NP porosas parecida al caso anterior, siendo que las NPs porosas son preparadas mediante películas delgadas de Au y Ag que son depositadas en sustrato de SiO₂ usando evaporación por haz de electrones. Por el proceso dewetting annealing las bicapas son puestas a 900° en Argón por 15 minutos, así obteniendo NPs en aleación de Au-Ag. Finalmente, la plata es retirada mediante ácido nítrico (65 wt %) obteniendo NPs de oro porosas. Las dimensiones obtenidas del poro son de alrededor de 20 nm mientras que el diámetro promedio de las NPs porosas de oro es de 300 nm [9]. Una imagen de las NPs se muestra en la figura 1.2

Según Jiang, R. y colaboradores reportan nanoestructuras de Ag sintetizadas mediante soluciones y combinaciones de AgNO₃ con DA (dodecylamine), DTAB (Dodecyltrimethylammonium bromide) y Tolueno, donde se controla el tamaño del poro cambiando la temperatura (50 °C, 70 °C, 100 °C, 105 °C y 120 °C) de la solución que por 24 hrs están bajo agitación magnética a 300 rpm. A pesar de no reportar exactamente el tamaño de la nanoestructura sintetizada, se reporta que tiene forma de barra o con semejanza a una esponja; mientras que, el tamaño de los poros si fueron reportados, teniendo un tamaño de 20 a 400 nm dependiendo de la temperatura con la que fueron

¹FIB: Haz de iones focalizado por sus siglas en inglés focused ion beam

²TEMEDS: Microscopio electrónico de transmisión equipado con un espectroscopio de energía dispersiva por sus siglas en inglés de transmission electron microscopy (TEM) equipped with an energy dispersive spectrometer (EDS)

³HRSEM: Microscopio electrónico de barrido de alta resolución por sus siglas en inglés de high-resolution scanning electron microscope

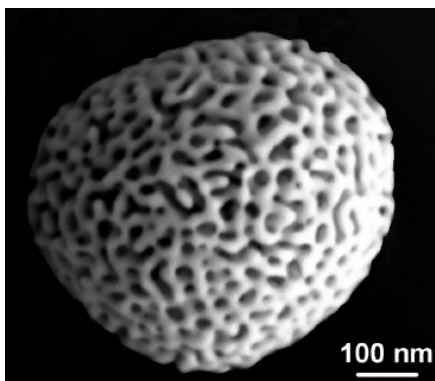
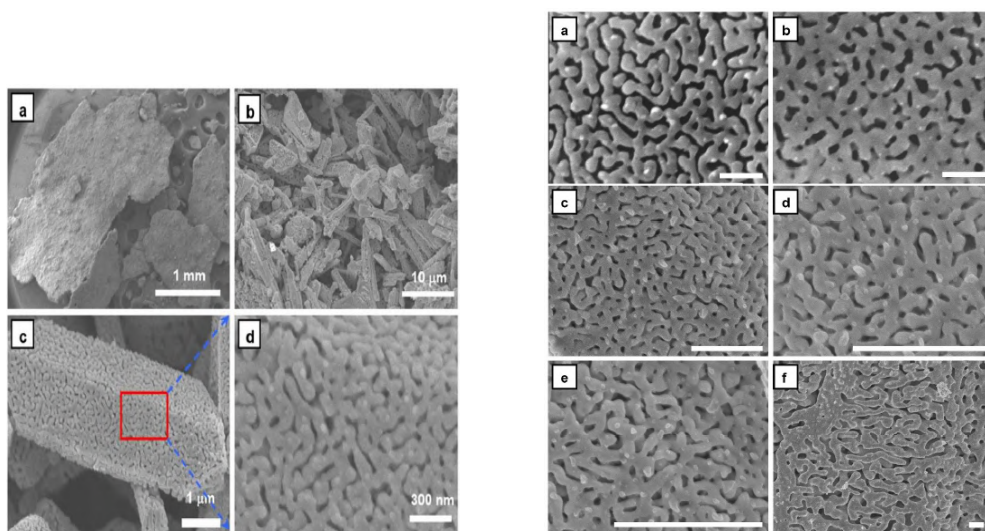


Figura 1.2: Micrografía HRSEM³ de NP de oro porosa en sustrato de SiO₂/Si (Kosinova et al., 2017, Fig 1 a)) [9].

sintetizadas [5]. En la figura 1.3a se observa la nanoestructura, semejante a una esponja. En la figura 1.3b donde se denotan los tamaños de poro obtenidos según la variación de la temperatura.



(a) Imágenes SEM de nanoestructuras porosas de plata con tamaño de poro de 30 nm sintetizada a 100° a) y b) Baja magnificación de la nanoestructura; c) El patrón SEM ampliado de la nanoestructura en forma de barra; d) Gran magnificación de la imagen SEM de la nanoestructura marcada en c).

(b) Nanoestructura porosa de Ag con varios tamaños de poro obtenidos a diferentes temperaturas. a) Sintetizada a temperatura ambiente (200 nm) b) Sintetizada a 50°C (150 nm) c) Sintetizada a 70°C (80 nm) d) Sintetizada a 85°C (50 nm) e) Sintetizada a 105°C (20 nm) f) Sintetizada a 120°C (400 nm). Las barras de escala están a 1 µm.

Figura 1.3: (Jiang et al., 2018, Figura 1, Figura 2 p. 3) [5].

Resultando más investigaciones esta en lo reportado por Detsi E. y colaboradores con NPs bimetalicas porosas, las cuales están compuesta de una aleación de Au-Ag. Los tamaños reportados son que, para los poros están en un rango de 20 nm a 25 nm con variaciones pequeñas de ± 5 nm dependiendo de la NP; mientras que, las NPs porosas tienen dimensiones desde 200 nm hasta 400 nm [7].

Además de acuerdo con Pedireddy, S. y colaboradores donde obtienen la porosidad de sus NPs

mediante el agente reductor hidroquinona, con el cual por su concentración pueden controlar el tamaño. Los autores reportan NPs porosas de oro con poros como hebras interconectadas en el material. El tamaño de las NPs va desde 150 nm a 650 nm de diámetro según la síntesis, mientras que, el tamaño del poro está en el rango de 3 nm hasta 30 nm dependiendo de las condiciones de síntesis [22].

Se observa que los diámetros de las NPs porosas de Au y Ag oscilan generalmente entre 200 nm y 600 nm, dependiendo del método de síntesis. De manera consistente, el tamaño de poro varía entre 10 nm y 30 nm.

El estudio de NPs metálicas porosas es un tema de gran interés debido a sus aplicaciones potenciales en campos como la óptica y la medicina. A pesar de que existen múltiples métodos reportados para su síntesis y estudios sobre efectos de NP porosas, no se ha llevado a cabo un análisis exhaustivo de sus propiedades ópticas más allá de la absorción o absorbancia. Por ejemplo, Qing W. y colaboradores muestran en la Figura 1.4 la absorbancia de nanopartículas porosas cuasiesféricas con diámetros de 200, 130 y 60 nm. Aunque se observa un cambio notable en la absorbancia, es interesante explorar también como actuaría en forma de eficiencia y aún mas, observar como es el comportamiento del espectro de eficiencia óptica de dispersión y extinción de estas nanopartículas.

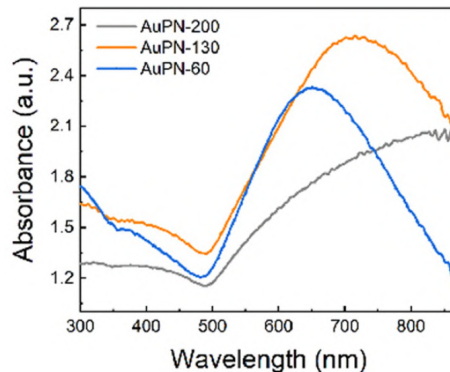


Figura 1.4: Espectro de absorción de nanopartículas de oro porosas de diferentes tamaños de diámetro (Qing et al., 2021, Figura 1 i) p. 2) [3].

De igual manera, la presencia de poros en las NP modifica la absorción, lo que sugiere que la morfología porosa podría influir en el campo cercano. Este cambio en la morfología despierta interés en estudiar cómo varía el campo cercano debido a la presencia de poros, ya que como muestra Noguez C. y colaboradores el campo electromagnético es dependiente de la morfología. Además muestran como influye el medio que rodea las NPs al campo, de tal manera que el medio influye en los efectos de NPs. Estos resultados se observan en la figura 1.5 donde se tienen nanorods de oro en forma de prismas truncados y prolatos, siendo los de la izquierda inmersos en el vacío y los de la derecha inmersos en agua [10].

Además, se han reportado efectos de presión por radiación en diversos contextos relacionados con las NP. Por ejemplo, la incidencia de una onda electromagnética puede generar fuerzas de atracción y repulsión, útiles en aplicaciones como pinzas ópticas. Liang M. y colaboradores han demostrado los efectos de la presión por radiación en haces de sincrotrón focalizados en el rango de rayos X, donde la incidencia de un haz sobre una partícula provoca su traslación sin rotación [23]. Por lo tanto, es interesante investigar cómo la presión por radiación actúa al incidir en una NP sólida en comparación con una NP porosa.

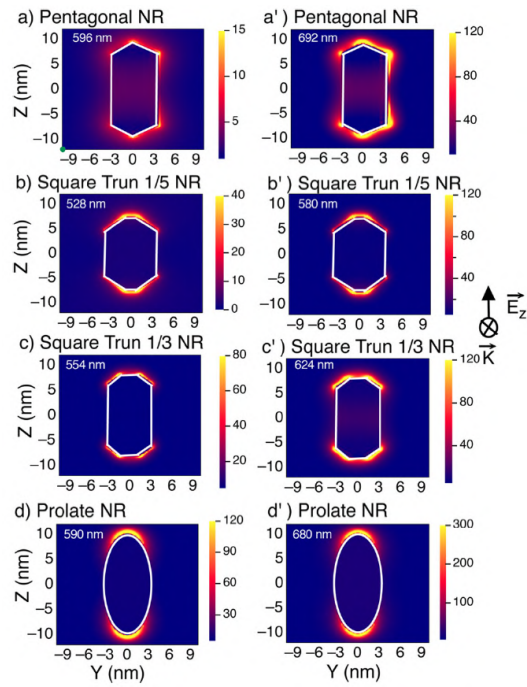


Figura 1.5: Aumento del campo electromagnético de nanorods de oro. a) Prisma pentagonal, b) prisma cuadrado con un truncamiento de 1/5, c) prisma cuadrado con un truncamiento de 1/3, y d) prolato. Las figuras no primadas corresponden al vacío y las primadas al agua como medio circundante. El campo incidente tiene un vector de onda perpendicular al plano YZ y una polarización a lo largo del eje Z (Noguez et al., 2014, Figura 11, p. 11) [10].

Capítulo 2

Hipótesis

Si bien ya se han encontrado algunos resultados sobre aplicaciones y características de NPs de oro y plata porosas como por ejemplo lo reportado por Anna Kosinova y colaboradores en el incremento de la absorbancia en longitudes de onda del visible en NP de oro porosas de diámetro de 300 nm y poros de 20 nm sintetizadas por métodos de aleaciones y desaleaciones [9]. O lo informado por Qing Wu y colaboradores donde sintetizan NPs de oro porosas de diferentes tamaños, entre 60 nm y 200 nm, por agentes fototérmicos y métodos de crecimiento con soluciones, mostrando como resultado cambios en la absorbancia en el espectro visible según el tamaño de las NPs además de estudiar su aplicación como agente antibacteriano [3]. Visto estos trabajos entre otros, es interesante plantearnos la pregunta ¿Por qué suceden estos cambios en la absorción al tener NPs porosas? De aquí se puede deducir que se debe a la morfología que al tener ciertos espacios vacíos al incidir una onda electromagnética en las NPs estas ondas se absorben y dispersan en la superficie de manera diferente a una NP sólida. De tal manera que el tema puede ser planteado con diferentes ideas que se pueden verificar, por ejemplo como cambia la absorción y dispersión al aumentar el número de poros en una NP o si los poros están rellenos de algún material por ejemplo agua, también se puede pensar en como cambiaría la absorción ante distintos tamaños de poros o el material circundante de la NP como aire o agua.

Con tal motivación y teniendo como pregunta de investigación ¿Cómo cambian las propiedades de ópticas de una NP porosa en comparación de una NP sólida? es que se desarrolla este estudio, además también se plantea dentro del trabajo otros fenómenos de interés como los efectos de presión por radiación y campo cercano generando las siguientes preguntas ¿Cambia la fuerza ejercida por la presión por radiación al incidir una onda electromagnética en NP porosas en comparación de una NP sólida? y ¿Como cambia el campo eléctrico cercano al tener poros en una NP?. De tal manera que se muestra a través de este trabajo el planteamiento y resultados de los fenómenos de las preguntas que motivaron a la investigación.

Dentro del presente estudio para desarrollar las preguntas es necesario mencionar los parámetros a tomar en cuenta al simular NPs porosas como su número de poros, tamaño de poro y forma del poro. Siendo en primer lugar que se notará una diferencia de volumen en la NP porosa comparando con la sólida, que al tener poros se tendrá un menor volumen, disminuyendo según la cantidad de poros y/o el tamaño de poros.

Con respecto a las eficiencias ópticas, se tendrá un cambio en la absorción dispersión y extinción, siendo un aumento en la absorción y una disminución en la dispersión en NPs porosas y con resultados proporcionales al aumento en el número y tamaño de poros.

Para la fuerza ejercida por presión por radiación entre la NP porosa y la NP sólida se observará un cambio en la fuerza ejercida de tal manera que la NP porosa tenga una fuerza mayor según aumente el número y tamaño de poro.

Y en el caso del campo eléctrico cercano se tendrá un aumento de su intensidad alrededor de los poros, de igual manera una interacción dentro de los poros siendo un aumento de la intensidad

del campo dentro y alrededor del material de los poros.

Si bien se tienen cambios, estos pueden no ser totalmente notables; es decir, se estima que las diferencias en las gráficas sean perceptibles pero no tan pronunciadas.

Se tienen múltiples parámetros, así como características distintas a tomar en cuenta, se debe considerar el enfoque de las posibilidades, siendo de esta manera que a medida que se tengan los resultados pueden surgir más diferencias, similitudes o propiedades que las antes mencionadas.

Capítulo 3

Objetivos

Dentro del trabajo se establecieron múltiples objetivos a cumplir, los objetivos se presentan de la siguiente manera:

3.1. Objetivo General

El objetivo de este proyecto es describir un estudio detallado de la respuesta óptica de NPs plasmónicas porosas de oro y plata. Este estudio incluye el cálculo de las eficiencias ópticas de absorción, dispersión y extinción, además de la intensidad del campo eléctrico cercano y la presión por radiación ejercida sobre las NPs. Se analizará la variación de parámetros como el número de poros, el material y morfología de la NP y el material que rellena los poros. Este análisis permitirá identificar las propiedades distintivas de las NPs porosas en comparación con las NPs sólidas.

3.2. Objetivos Específicos

Para alcanzar el objetivo general, se desarrollarán los siguientes objetivos específicos:

- Generar códigos computacionales que faciliten la creación de NPs porosas y sólidas, capaces de realizar los cálculos requeridos por el usuario y proporcionar control sobre las propiedades de dichas NPs.
- Calcular la respuesta plasmónica, las eficiencias ópticas (absorción, dispersión y extinción) y el campo eléctrico cercano de NPs porosas de oro y plata con distintos grados de porosidad y material que rellene los poros ante distintas longitudes de onda.
- Calcular la presión por radiación ejercida sobre NPs porosas de oro y plata con distintos grados de porosidad y material que rellene los poros ante distintas longitudes de onda.
- Realizar un análisis comparativo de la respuesta óptica y la presión por radiación entre NPs sólidas y porosas, destacando las diferencias y similitudes.
- Calcular el campo cercano de las NPs porosas y notar un aumento del mismo en los poros.
- Determinar el comportamiento general de la respuesta óptica y la presión por radiación de las NPs porosas para generar conclusiones relevantes y fundamentadas que puedan servir de base para el desarrollo de aplicaciones futuras.
- Planteamiento de futuras aplicaciones en campos como la medicina, óptica y electrónica.

Si bien se tienen múltiples objetivos, cada uno tiene una relación entre sí y serán secuenciales según avance el tema en la investigación.

Capítulo 4

Parte teórica

En este capítulo se presentan los conceptos y fundamentos utilizados para el estudio y entendimiento de la interacción de una NP porosa con radiación electromagnética, siendo descritos conceptos empleados en los resultados como la absorción, dispersión y extinción en NP, presión por radiación y campo eléctrico, entre otros.

4.1. Clasificación de poros

De acuerdo al manual *Manual of Symbols and Terminology for Physicochemical Quantities and Units* [11] el poro se puede definir como el espacio vacío en un material, en algunos casos este espacio está relleno de algún otro material como gases o líquidos. La superficie asociada con el sólido y los poros es llamada superficie interna y la accesibilidad a dicha superficie depende del tamaño de las moléculas que compongan al material a introducir en los poros esto es llamado efecto tamiz molecular y es regularmente visto en materiales porosos que se usan como agentes absorbentes para gases y líquidos.

El tamaño de los poros por simplicidad cuando son conocidos y similares a cierta forma se pueden describir en términos de cilindros, prismas, cavidades y ventanas, celdas, botellas o esferas, ya que pueden tener una forma complicada debido a diferentes formas y tamaños de poros en un mismo material o conexiones entre poros que hacen variar el tamaño y forma según la localización. Cuando se tiene una forma bien definida de los poros en un material es sencillo determinar el tamaño de poro pero en la mayoría de casos al tener poros de formas irregulares o poco convencionales se toma la dimensión más pequeña como la anchura de poro. Por ejemplo en un poro cilíndrico la anchura del poro sería su diámetro [12].

La clasificación de los poros según su tamaño está dado por la tabla 4.1, donde se muestra que según la anchura de los poros se clasifican de cierta manera.

Tabla 4.1: Clasificación de los poros según la anchura de poro [12].

Anchura del poro	Tipo de poro
>50 nm	Macroporos
≤ 2 nm	Microporos
Entre 2 nm y 50 nm	Mesoporos

Los poros son espacio sin material de una estructura y pueden ser clasificados según su tamaño, pero cada poro tiene una forma de síntesis particular dependiendo del material, así como propiedades diferentes. Por ejemplo un microporo en algunos casos puede ser considerado como un espacio de absorción [11].

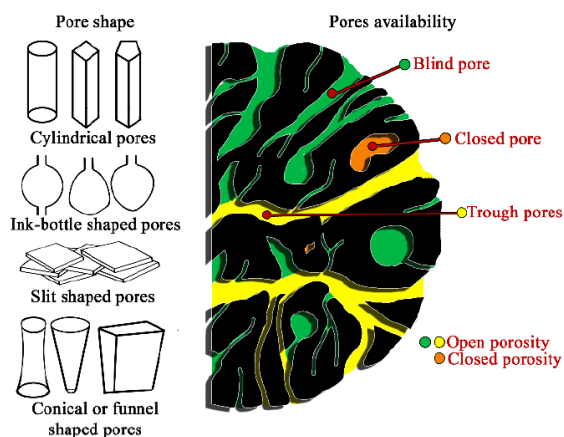


Figura 4.1: Esquema de la clasificación de poros, de acuerdo a su forma geométrica y accesibilidad (Sarna-Boś et al, 2021, fig 1 [13]). Del lado izquierdo se muestran las formas de los poros, iniciando con poros cilíndricos, después poros en forma de botella, poros en forma de rendija y poros en forma de conos o embudos. En el lado derecho se muestran de color verde los poros sin salida y de amarillo los poros que atraviesan, ambos siendo poros abierto y de color naranja los poros cerrados.

Los poros dependiendo de su accesibilidad pueden dividirse en dos categorías, abiertos y cerrados. Poros cerrados o residuales son aquellos que no tienen comunicación alrededor y por lo mismo no están asociados a la absorbancia de un material, tienen solamente una influencia mecánica sobre el material. Los poros abiertos por su parte son poros con canales abiertos que comunican partes de la superficie del material, estos pueden ser poros sin salida o poros que atraviesan el material, dentro de ellos puede haber líquidos o gases además de generar fenómenos de intercambio de calor, filtración, difusión o reacciones químicas [13].

Como se mencionó antes los poros se clasifican según su tamaño y se describen también según su forma, además de dividirse en dos categorías, en figura la 4.1 se muestra las formas de los poros, además de poros abiertos (poros sin salida y poros que atraviesan) y cerrados.

Las clasificaciones del tamaño de poro mencionadas son basadas en lo propuesto por la IUPAC, sin embargo, hay más clasificaciones propuestas por tamaños o por sus funciones como se muestra en las tablas 4.2 y 4.3

Tabla 4.2: Tipo de poros en nm, clasificación de poros basados en el ancho del poro y sus funciones desde macroporo hasta microporo [13].

Clasificación por tamaño de poro (nm)	Macroporo	Mesoporo	Microporo
Dubinin, 1979	$d > 200$	$200 - 400 > d > 3 - 3.2$	$d < 0.6 - 0.7$
IUPAC, 1972	$d > 50$	2-50	$d < 2$
Cheremskoj, 1985	> 2000	-	$2000 > d > 200$
Clasificación por función de poro	Transmisión	Almacenamiento	Residual
Greenland y Pereira, 1977	50,000-500,000	500-50,000	$d < 500$

Se pueden clasificar a los poros de distintas maneras y tener tamaños y formas variados de estos como se mencionó anteriormente, esto genera el interés en los poros por sus posibles efectos en los materiales como cierta transferencia de calor, absorción y su efecto mecánico. Los materiales porosos han estado en auge durante los últimos años de tal manera que sea posible obtener distintos materiales porosos con características únicas para cada estructura de distintos materiales. Los poros están presentes en materiales orgánicos, inorgánicos y materiales inorgánicos-orgánicos, así como en estructuras amorfas y cristalinas como por ejemplo zeolitas, estructuras orgánicas covalentes, carbonos microporosos y polímeros organometálicos [14]. De esta forma que los poros también

Tabla 4.3: Tipo de poros en nm, clasificación de poros basados en el ancho del poro y sus funciones desde supermicroporo hasta submicroporo [13].

Clasificación por tamaño de poro (nm)	Supermicroporo	Ultramicroporo	Submicroporo
Dubinin, 1979	$3 - 3.2 < d < 1.2 - 1.4$	-	-
IUPAC, 1972	0.7-2	$d < 0.7$	-
Cheremskoj, 1985	-	$< 2 - 4$	< 200
Clasificación por función de poro	Enlazamiento		
Greenland y Pereira, 1977	$d < 5$		

pueden aparecer en NPs metálicas como el oro y la plata.

4.2. Absorción, dispersión y extinción

Las propiedades ópticas de las NPs metálicas dependen del tamaño y la forma de las mismas, así como del material del que están compuestas. Se denota que cuentan con resonancias de plasmones de superficie localizados que son dependientes de estos factores. Para entender la influencia de la morfología, el tamaño, material conductor o la polarización de la interacción con la onda incidente en una NP, es necesario considerar los parámetros óptico de las eficiencias ópticas: absorción, dispersión y extinción.

Cuando sobre una NP incide una onda electromagnética (EM), pueden suceder dos fenómenos ópticos: la dispersión de la onda, redireccionándola sin alteración en algunos casos, y/o la absorción, cuando la energía de la onda coincide con los estados de excitación de la NP, lo cual depende de la frecuencia incidente o, equivalentemente, de la energía del fotón entrante $\mathcal{E} = h\nu$ [19].

El proceso en el que una onda EM incide en una NP y se convierte en energía térmica se conoce como absorción. Por otro lado, si al incidir una onda EM no se produce ninguna transición atómica resultante y los átomos permanecen en su estado original, reflejando la onda, se trata del efecto de dispersión [19]. La dispersión puede ser elástica o inelástica. En la dispersión elástica, solo cambia la dirección de la onda incidente, mientras que en la dispersión inelástica, además de la dirección, cambia la energía de la onda.

Basándonos en lo anterior y en la sección 4.5, se pueden estudiar los efectos de la absorción y dispersión en función de las secciones transversales C_{abs} y C_{sca} , así como en eficiencias ópticas. Estas se definen como la sección transversal por unidad de área A , de la siguiente manera:

$$Q_{\text{abs}} = \frac{C_{\text{abs}}}{A}, \quad (4.1)$$

$$Q_{\text{sca}} = \frac{C_{\text{sca}}}{A}. \quad (4.2)$$

Donde Q_{abs} es la eficiencia óptica de absorción y Q_{sca} es la eficiencia óptica de dispersión, la unidad de área A es el área transversal de la partícula, por ejemplo en el caso de una esfera $A = \pi r^2$.

De igual forma, se puede definir la eficiencia óptica extinción como la suma de la eficiencia óptica absorción y la eficiencia óptica dispersión de la NP, de tal manera que:

$$Q_{\text{ext}} = Q_{\text{abs}} + Q_{\text{sca}} = \frac{C_{\text{ext}}}{A}. \quad (4.3)$$

Siendo Q_{ext} es la eficiencia óptica de extinción [17].

Por lo tanto, las eficiencias ópticas de una NP relacionan los efectos provocados por una onda EM incidente, con la absorción y dispersión de dicha onda por la NP.

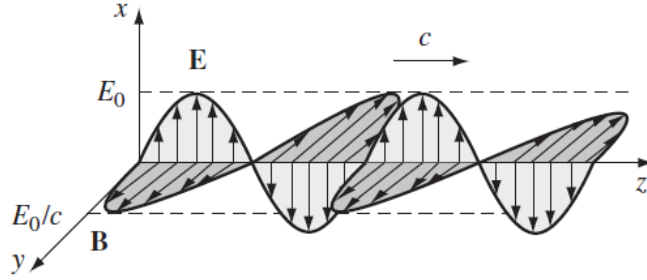


Figura 4.2: Onda EM plana polarizada en dirección \hat{x} y viajando en dirección \hat{z} , $\hat{\mathbf{E}} = \hat{x}$ Y $\hat{\mathbf{B}} = \hat{y}$ (Griffiths, 2017, fig. 9.10, p. 397).

4.3. Presión por radiación

La presión por radiación se define como el efecto de presión generado por una onda EM incidente a una superficie de tal manera que hay una transferencia de momento, la presión por radiación es un efecto debido a una onda generando una fuerza. A continuación, presentamos un desarrollo general para deducir la presión por radiación. Para comprender la presión por radiación es importante recordar que las ondas EM son descritas con las ecuaciones de Maxwell pero en particular veamos ondas EM planas monocromáticas las cuales se denominan de esta forma por la uniformidad del campo en todos los planos perpendiculares a la dirección de propagación, de tal forma que se tienen las ecuaciones de campo de la siguiente manera:

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) = \tilde{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \hat{\mathbf{n}}, \quad (4.4)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \tilde{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{n}}) = \frac{1}{c} (\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{E}}). \quad (4.5)$$

Donde $\tilde{\mathbf{E}}$ es el campo eléctrico complejo, $\tilde{\mathbf{B}}$ la inducción magnética compleja, \mathbf{k} es el vector de propagación, \mathbf{r} la dirección en la que viaja la onda, t el tiempo, ω la frecuencia angular y $\hat{\mathbf{n}}$ el vector de polarización. Se observa que la magnitud de los campos eléctricos y la inducción magnética tienen cierta relación de proporcionalidad entre sí, además de ser perpendiculares uno del otro. Ahora tomando los campos eléctricos y la inducción magnética reales en una onda plana monocromática con vector de propagación \mathbf{k} y polarización $\hat{\mathbf{n}}$ se tiene

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta) \hat{\mathbf{n}}, \quad (4.6)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} E_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta) (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{n}}). \quad (4.7)$$

δ representa la fase en la onda. Una representación de estas onda se presenta en la figura 4.2.

Las ondas EM tienen una energía y momento, siendo entonces que tienen una energía total almacenada u , esta es la energía por unidad de volumen que esta definida como:

$$u = \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0} B^2 \right). \quad (4.8)$$

Donde ϵ_0 la permitividad en el vacío y μ_0 la permeabilidad en el vacío.

En la onda plana monocromática como se muestra en la ecuación (4.6) y (4.7) se tiene que:

$$\mathbf{B}^2 = \frac{1}{c^2} \mathbf{E}^2 = \epsilon_0 \mu_0 \mathbf{E}^2, \quad (4.9)$$

$$\mathbf{E}^2 = E_0^2 \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta) \quad (4.10)$$

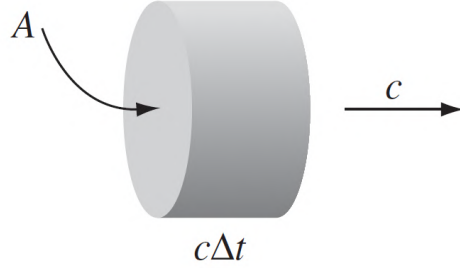


Figura 4.3: \mathbf{S} en un Δt , una longitud $c\Delta t$ que atraviesa un área A (Griffiths, 2017, fig. 9.12, p. 399).

Con las ecuaciones (4.8) y (4.9) se muestra que la energía por unidad de volumen de una onda EM plana monocromática es:

$$u = \epsilon_0 E^2 = \epsilon_0 E_0^2 \cos^2((\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta)). \quad (4.11)$$

De tal manera que una onda plana monocromática al viajar transporta la energía u . De manera que ahora relacionando la energía por unidad de área en un cierto tiempo se determina la densidad del flujo de energía transportada por el campo. Tomando el vector de Poynting:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}). \quad (4.12)$$

En una onda plana monocromática de las ecuaciones (4.6) y (4.7) propagándose en dirección \hat{z} , se tiene para el vector de Poynting de la ecuación (4.12)

$$\mathbf{S} = c\epsilon_0 E_0^2 \cos^2(kz - \omega t + \delta) \hat{z} = cu \hat{z}. \quad (4.13)$$

Por lo que resulta que \mathbf{S} es la densidad de energía u por la velocidad de la ondas $c\hat{z}$. Siendo así que para un tiempo Δt una longitud $c\Delta t$ de un objeto, que atraviesa su área A , ver en la figura 4.3, se tiene que transporta una energía $uAc\Delta t$. Entonces la energía por unidad de tiempo, por unidad de área transportada por la onda es uc

Además de transportar energía las ondas EMs transportan momento, el momento almacenado en un campo se representa como:

$$\mathbf{p} = \mu_0 \epsilon_0 \int_v \mathbf{S} d\tau. \quad (4.14)$$

Donde se tiene la integral de volumen del vector de Poynting para un volumen v , de tal manera que \mathbf{p} representa el momento asociado con el campo dentro del volumen.

Ahora la densidad de momento en un campo es

$$\mathbf{g} = \frac{\mathbf{p}}{d\tau}, \quad (4.15)$$

de manera que por las ecuaciones (4.14) y (4.15) la densidad de momento almacenada en un campo se define como:

$$\mathbf{g} = \mu_0 \epsilon_0 \mathbf{S} = \epsilon_0 (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{c^2} \mathbf{S}. \quad (4.16)$$

Donde para una onda plana monocromática propagándose en dirección \hat{z} , del vector de Poynting de la ecuación (4.13) se tiene que

$$\mathbf{g} = \frac{1}{c} \epsilon_0 E_0^2 \cos^2(kz - \omega t + \delta) \hat{z} = \frac{1}{c} u \hat{z}. \quad (4.17)$$

Para u , \mathbf{S} , y \mathbf{g} se puede obtener el valor promedio de las fluctuaciones del coseno cuadrado, de manera que tomando el promedio del coseno cuadrado sobre un ciclo completo, es $\langle \cos^2 \rangle = \frac{1}{2}$, se tiene que:

$$\langle u \rangle = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_0^2, \quad (4.18)$$

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} c \epsilon_0 E_0^2 \hat{z}, \quad (4.19)$$

$$\langle \mathbf{g} \rangle = \frac{1}{2c} \epsilon_0 E_0^2 \hat{z}. \quad (4.20)$$

Con $\langle \rangle$ se denota el tiempo promedio en completar un ciclo. Por otro lado se define la intensidad como la potencia promedio transportada por una onda por unidad de área,

$$I \equiv \langle S \rangle = \frac{1}{2} c \epsilon_0 E_0^2. \quad (4.21)$$

Cuando la luz incide sobre una superficie, la onda transfiere su momento a la superficie. En un tiempo Δt en un material de área A , el momento transferido esta dado por $\Delta \mathbf{p} = \langle \mathbf{g} \rangle A c \Delta t$. De esta forma se define la **presión por radiación** (Fuerza promedio por unidad de área), como:

$$P = \frac{1}{A} \frac{\Delta p}{\Delta t}. \quad (4.22)$$

Veamos que para un absorbente perfecto

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{A} \frac{\Delta p}{\Delta t}, \\ &= \frac{1}{A} \frac{\langle g \rangle A c \Delta t}{\Delta t}, \\ &= \langle g \rangle c, \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_0 E_0^2, \\ P &= \frac{I}{c}, \end{aligned}$$

y para un reflector perfecto la presión es el doble de grande, ya que al no absorber se ve mayor la presión ejercida. Con apoyo de la figura 4.2 analicemos el caso, el campo eléctrico impulsa las cargas en la dirección \hat{x} , y el campo magnético ejerce sobre ellas una fuerza $\mathbf{F}_B = q(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ la cual por el producto cruz de v en dirección \hat{x} con B en dirección \hat{y} da que la fuerza se ejerce en dirección \hat{z} . La fuerza neta sobre todas las cargas en el reflector perfecto es el doble de grande, porque el momento cambia de dirección en lugar de ser absorbido en la superficie. La fuerza neta sobre todas las cargas de la superficie produce la presión [20].

4.4. Campo eléctrico

El campo eléctrico \mathbf{E} cuenta con magnitud y dirección, además de ser dependientes de variables como las cargas, la distancia entre las cargas o la carga y un punto en específico.

4.4.1. Campo eléctrico de una distribución de cargas

El campo eléctrico estático tiene relación con las cargas eléctricas, dichas cargas pueden relacionarse como la fuente de cargas q_i que se encuentra en un punto y la carga prueba Q que está a

una distancia τ de la fuente de cargas. A esta distancia τ hay una fuerza de repulsión o atracción, entre las cargas de la fuente y la carga prueba, de tal manera que por la ley de Coulomb y el principio de superposición se puede relacionar las fuerzas con el campo de la siguiente manera:

$$\mathbf{F} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{q_i}{\tau_i^2} \hat{\mathbf{t}}_i, \quad (4.23)$$

$$\mathbf{F} = Q\mathbf{E}. \quad (4.24)$$

Siendo ϵ_0 la permitividad en el vacío.

De tal forma que el campo eléctrico de las cargas fuente en un punto \mathbf{r} es:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{q_i}{\tau_i^2} \hat{\mathbf{t}}_i. \quad (4.25)$$

Siendo en función de la posición \mathbf{r} , ya que el vector de separación τ_i depende del punto del campo P pero no de la carga Q , siendo el punto del campo P el punto donde se desea calcular el campo generado por una carga, dicho de otra forma si P esta a una distancia \mathbf{r} del origen y la carga q_i esta a una distancia \mathbf{r}'_i entonces $\tau_i = \mathbf{r} - \mathbf{r}'_i$. *El campo eléctrico es una cantidad vectorial que varía de un punto a otro y que viene determinada por la configuración de las cargas fuente; físicamente, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ es la fuerza por unidad de carga que se ejercería sobre una carga de prueba, si se colocara en P [20].*

En la ecuación (4.25) se trata de una colección de puntos discretos pero la ecuación escrita para una distribución continua de cargas en una región es:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{\tau^2} \hat{\mathbf{t}} dq. \quad (4.26)$$

Un campo de interés es el campo dentro o cerca de una NP debido a la interacción con una onda EM, ya que la NP genera un campo debido a su distribución de cargas que la conforman, siendo este campo dinámico. El campo en una NP puede calcularse al tener un campo eléctrico macroscópico $\mathbf{E}_{\text{macro}}$ y el campo eléctrico microscópico $\mathbf{E}_{\text{micro}}$ de la NP, el $\mathbf{E}_{\text{macro}}$ se define como el promedio del campo en regiones suficientemente grandes para suavizar las fluctuaciones microscópicas pero con regiones no más grandes que las dimensiones de la NP para evitar eliminar las variaciones significativas a gran escala del campo, por su parte $\mathbf{E}_{\text{micro}}$ se define como el campo eléctrico de una escala muy pequeña a nivel átomos y moléculas. Este campo incluye las contribuciones de todas las cargas y corrientes en la proximidad inmediata y es generado por un átomo o una parte puntual de la NP.

También se debe hacer énfasis que el campo macroscópico tiene una relación con \mathbf{D} que es el desplazamiento eléctrico el cual se define como un vector que representa el campo eléctrico en un medio. En unidades de CGS se define como:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} \quad (4.27)$$

Donde \mathbf{P} es la polarización del material (momento dipolar eléctrico por unidad de volumen).

Una consecuencia de la dependencia de la frecuencia ω en $\epsilon(\omega)$ es la relación entre el campo eléctrico dinámico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ y el desplazamiento $\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega)$ de los cuales se relacionan por

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \epsilon(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (4.28)$$

Donde se tiene una relación del campo eléctrico y el material ante una frecuencia ω [21].

Retomando el cálculo del campo, con $\mathbf{E}_{\text{macro}}$ y viendo la forma en que se opone $\mathbf{E}_{\text{micro}}$, se tienen las siguientes relaciones del $\mathbf{E}_{\text{macro}}$ y la polarización macroscópica de la NP definida como $\mathbf{P} = n\alpha\mathbf{E}_{\text{micro}}$, donde n es la densidad numérica de partículas y α es la polarizabilidad de una

sola partícula, de tal manera que con las ecuaciones (4.28) y (4.27) para el campo macroscópico se tiene:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}_{\text{macro}}, \quad (4.29)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{E}_{\text{macro}} + 4\pi \mathbf{P}, \quad (4.30)$$

$$\mathbf{P} = \frac{-1}{4\pi} [\mathbf{E}_{\text{macro}} - \mathbf{D}] \therefore \quad (4.31)$$

$$\mathbf{P} = \left(\frac{1}{4\pi} \right) (\epsilon - 1) \mathbf{E}_{\text{macro}}. \quad (4.32)$$

Ahora observemos la relación *Clausius-Mossotti*¹:

$$\frac{4\pi n\alpha}{3} = \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2}. \quad (4.33)$$

Entonces sustituyendo la polarizabilidad χ con la relación *Clausius-Mossotti* se tiene

$$n\alpha \mathbf{E}_{\text{micro}} = \left(\frac{1}{4\pi} \right) (\epsilon - 1) \mathbf{E}_{\text{macro}}, \quad (4.34)$$

$$n\alpha \mathbf{E}_{\text{micro}} = \left(\frac{n\alpha(\epsilon + 2)}{3} \right) \mathbf{E}_{\text{macro}}, \quad (4.35)$$

$$\mathbf{E}_{\text{micro}} = \left(\frac{\epsilon + 2}{3} \right) \mathbf{E}_{\text{macro}}. \quad (4.36)$$

Despejando a E_{macro} se tiene

$$\mathbf{E}_{\text{macro}} = \left(\frac{3}{\epsilon + 2} \right) \mathbf{E}_{\text{micro}}. \quad (4.37)$$

De tal forma que la ecuación (4.37) es la relación entre el campo macroscópico y microscópico de una NP. Esto muestra que se puede obtener el E_{macro} de una NP con la contribución del campo E_{micro} de sus moléculas y la permitividad ϵ del material de la NP.

4.5. Plasmones de superficie localizados

Como ya se ha mencionado anteriormente, los plasmones de superficie localizados (LSP, por sus siglas en inglés) son excitaciones en nanoestructuras metálicas inducidas por un campo EM incidente. Cuando una onda EM incide sobre la nanoestructura, los electrones de conducción en la misma son excitados, provocando una oscilación coherente de estos electrones y generando un desplazamiento en la nube de electrones. La excitación de los electrones de conducción ocurre porque el tamaño de la nanoestructura y la longitud de onda del campo EM incidente están en resonancia, dicha resonancia se produce cuando la frecuencia del campo EM incidente coincide con la frecuencia natural de oscilación de los electrones en la nanoestructura teniendo un amplificación de la vibración. Estos modos surgen de forma natural del problema de dispersión de una pequeña

¹La relación *Clausius-Mossotti* en CGS se obtiene de la polarizabilidad $\mathbf{P} = n\alpha \mathbf{E}$ donde $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{macro}} + \frac{4\pi}{3} \mathbf{P}$, entonces $\mathbf{P} = n\alpha(\mathbf{E}_{\text{macro}} + \frac{4\pi}{3} \mathbf{P})$ y siendo la susceptibilidad $\chi = \frac{P}{E}$ entonces $\chi = \frac{n\alpha}{1 - \frac{4\pi}{3} n\alpha}$ por definición $\epsilon = 1 + 4\pi\chi$ entonces $\chi = \frac{1}{4\pi}(\epsilon - 1)$ reescribiendo se tiene $\frac{1}{4\pi}(\epsilon - 1) = \frac{n\alpha}{1 - \frac{4\pi}{3} n\alpha}$ de tal manera que $\epsilon - 1 = \frac{4\pi n\alpha}{1 - \frac{4\pi n\alpha}{3}}$ y calculando se llega a $\epsilon + 2 = \frac{4\pi n\alpha + 3 - 4\pi n\alpha}{1 - \frac{4\pi n\alpha}{3}} = \frac{3}{1 - \frac{4\pi n\alpha}{3}}$ por lo que $\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4\pi n\alpha}{3}$

nanopartícula conductora expuesta a una longitud de onda específica en un campo EM oscilante [15].

En presencia de una onda EM la superficie de la nanopartícula ejerce una fuerza restauradora efectiva sobre los electrones de conducción, de modo que puede surgir una resonancia, lo que conduce a la amplificación del campo tanto en el interior como en la zona de campo cercano fuera de la partícula. Esta resonancia también es conocida como resonancia de plasmón de superficie localizado (LSPR) o resonancia de plasmón localizada corta. Se debe considerar la interacción de las NPs metálicas con una onda EM para llegar a la condición de resonancia. Un caso especial de resonancia por ejemplo se encuentra en el oro y la plata, el cual encuentra dicha resonancia en el espectro EM del visible [15].

Los plasmones de superficie localizados representan un fenómeno fundamental en la interacción de una onda EM incidente con nanoestructuras metálicas, donde la polarizabilidad juega un papel crucial en la determinación de las propiedades ópticas de las NPs, permitiendo obtener la absorción, dispersión y extinción de la NP por su interacción con el campo EM.

Supongamos un campo aplicado \mathbf{E}_0 sobre una NP, además considerando una NP homogénea, isotrópica y de forma esférica de radio a , en la nanoesfera se induce un momento dipolar de magnitud proporcional a $|E_0|$, definido como

$$\mathbf{p} = 4\pi\epsilon_0\epsilon_m a^3 \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \mathbf{E}_0, \quad (4.38)$$

donde ϵ_m es la constante dieléctrica del medio y ϵ la constante dieléctrica del material de la NP la cual es un valor complejo.

La polarizabilidad α se relaciona con el momento dipolar por $\mathbf{p} = \epsilon_0\epsilon_m\alpha\mathbf{E}_0$, así se tiene que

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m}. \quad (4.39)$$

De la ecuación (4.39) observamos que si $(\epsilon + 2\epsilon_m)$ tiende a 0 y es $Im[\epsilon]$ es un valor despreciable, entonces α se encuentra en su máximo y se da la resonancia, además de obtener la relación $Re[\epsilon(w)] = -2\epsilon_m$. Esta relación es conocida como "condición de Fröhlich", y el modo asociado (en el campo oscilante) el plasmón de superficie dipolar de la NP metálica.

La polarización α en la resonancia de la NP con el campo EM, da un realce simultáneo en la eficiencia óptica de absorción y dispersión de la luz de cada NP metálica. Definiendo la sección transversal de la dispersión y absorción (C_{sca} y C_{abs} , respectivamente), calculadas por el vector de Pointing y su relación con la polarizabilidad, dada por

$$C_{sca} = \frac{k^4}{6\pi} |\alpha|^2 = \frac{8\pi}{3} k^4 a^6 \left| \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right|^2, \quad (4.40)$$

$$C_{abs} = kIm[\alpha] = 4\pi k a^3 Im \left[\frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right]. \quad (4.41)$$

Siendo k el número de onda $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

De éstas se define entonces la sección transversal de la extinción como $C_{ext} = C_{abs} + C_{sca}$ [15,16].

4.5.1. Plasmones para distintas morfologías

Como se mencionó antes un campo eléctrico incidente en una NP causa que los electrones de conducción oscilen, provocando un desplazamiento de la nube de electrones y un movimiento de las cargas debido a las fuerzas de Coulomb entre las cargas positivas y negativas que componen a la NP y una onda incidente. En las NP metálicas, este movimiento colectivo de las cargas o excitación resulta en la resonancia de los plasmones de superficie localizados [17].

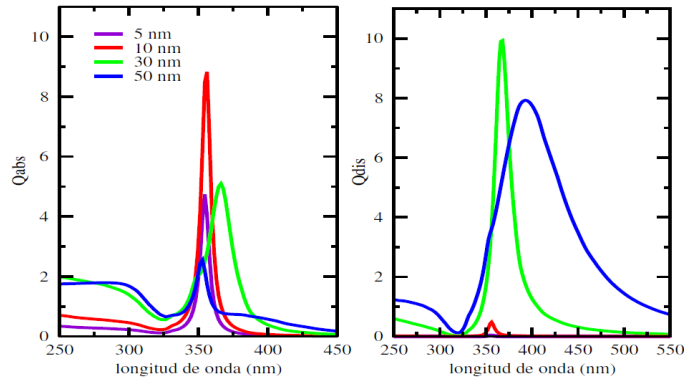


Figura 4.4: Absorción y dispersión de NP esféricas de plata en función del radio (González, 2007, Figura 2.7, p. 20) [18].

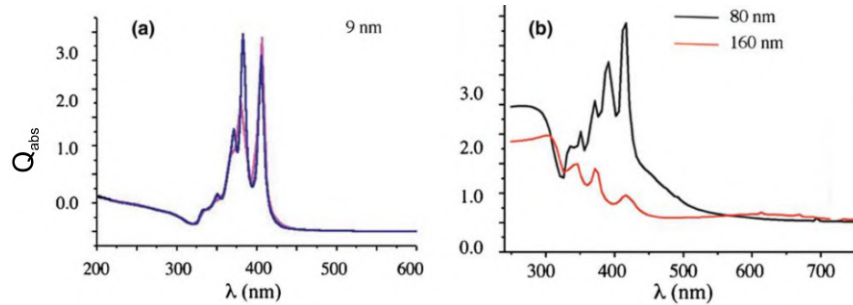


Figura 4.5: Eficiencia de absorción (Q_{abs}) de NP cúbicas de plata para diferentes tamaños (Noguez, 2005, Fig. 2 p. 3) [16].

Plasmones de superficie localizados en una nanopartícula esférica

Las nanoestructuras esféricas son un caso especialmente interesante debido a su simetría. Son isotrópicas es decir sus efectos son invariantes ante cualquier dirección del plano y no presentan aristas. Debido a esto, una esfera de plata, por ejemplo, muestra una banda en la región visible correspondiente a su resonancia de plasmón superficial localizado [17]. Este comportamiento se observa por ejemplo en lo reportado por González A.L. [18] en la figura 4.4 donde se muestra las eficiencias ópticas de absorción y dispersión para una esfera de plata de distintos radios.

A pesar de que el material de la esfera, el medio circundante y su tamaño influyen en la resonancia del plasmón, la morfología esférica tiene una absorción estable y predecible tal que la vuelve un candidato para estudiar en diferentes circunstancias como por ejemplo cambiando el medio circundante de la nanoesfera o modificando su estructura de manera ligera.

Plasmones de superficie localizados en una nanopartícula cúbica

Las nanoestructuras cúbicas, por su geometría, presentan una gran cantidad de bandas en su absorción, representando las resonancias de plasmones superficiales localizados. A diferencia de las esferas, los cubos tienen una absorción más compleja, es decir, se cuenta con un patrón irregular y con múltiples bandas, además de ser muy variable según el tamaño, esto es debido a la distribución de los electrones y su interacción en las aristas y vértices [17], la absorción de una NP cúbica según su tamaño se observa en lo reportado por Noguez C. [16] en la figura 4.5 donde se puede ver una rica estructura de bandas y una diferencia entre las líneas espectrales dependiendo del tamaño.

Las resonancias de plasmones superficiales pueden variar no solo por la morfología, sino

también dependiendo del medio circundante, el tamaño y el material de la NP.

Se puede concluir que la morfología tiene un impacto significativo en las propiedades de las NPs. Existen diferencias notables en las resonancias plasmónicas y la absorción entre las distintas formas, y estas diferencias se acentúan con variaciones en el medio circundante y el tamaño de las NPs.

4.6. Efectos de tamaño y morfología

Como se ha mencionado si una NP es incidida por un campo EM, los electrones de la NP oscilan y las cargas que conforman a la NP pueden transformar la energía de la onda incidente en energía térmica, en un proceso denominado absorción. Las cargas son aceleradas de forma que irradian energía en cualquier dirección, en lo que se denomina proceso de dispersión. La suma de ambos efectos se denomina extinción de la luz. Entonces, la sección transversal de extinción se define como la potencia del campo EM total que atraviesa la superficie perpendicular a la onda incidente de la partícula en función de la irradiancia de la luz incidente [16], esto visto en la sección 4.5 donde se obtuvieron las secciones transversales de la ecuación 4.40.

Entonces al irradiar a una NP con una onda EM se pueden obtener eficiencias ópticas relacionadas con la sección transversal de absorción, extinción y dispersión de tal manera que se pueden analizar y obtener las bandas que demuestran una cierta resonancia ante la onda incidente.

Con una NP sólida de plata donde varía su tamaño y es de forma esférica mostrada en la figura 4.4, en primera instancia se obtiene una sola banda de absorción y se encuentra que hay un desplazamiento en la nube de electrones si hay un cambio en el tamaño de tal forma que se tienen cargas multipolares, siendo entonces que la banda de absorción se ensancha y se vuelve asimétrico, así como un desplazamiento en el modo dipolar según cambia el tamaño.

La NP de forma cúbica de las gráficas presentadas en la figura 4.5 tiene como resultados que su eficiencia de absorción tiene múltiples bandas en su línea espectral, los cuales son generados por la resonancia debido a la geometría del cubo, ya que las cargas pueden distribuirse de maneras diferentes, incluso en el límite cuasiestático, esto pasa en general para cualquier tamaño de una NP cúbica. Para los cubos pequeños, las bandas son más angostas que los de los cubos más grandes. Esto se debe a los efectos de amortiguación de la radiación, que desplazan el espectro a longitudes de onda mayores, hacen más amplias las bandas y disminuye la intensidad. En los cubos grandes las contribuciones multipolares altas adquieren importancia [16].

De tal manera que se observa que ante variaciones de tamaño y un cambio de morfología las NP cambian los resultados eficiencias ópticas, de tal manera que al analizar cubos y esferas de las gráficas de las figuras 4.4 y 4.5 se tiene un comportamiento diferente entre ellas, sobre todo mostrando en sus líneas espectrales siendo que los cubos tiene una línea espectral con múltiples bandas, mientras que la esfera muestra una línea espectral más predecible y suave de una sola banda. Por su parte en cada una de estas NPs se observa que los cambios de tamaño afectan a las eficiencias ópticas de tal manera que puede haber un cambio total en sus líneas espectrales como un desplazamiento en la longitud de onda o una magnitud menor hasta una atenuación de las bandas debido a las contribuciones multipolares provocados por el tamaño.

Si bien los efectos de tamaño en las eficiencias ópticas mostrados son solo para la plata, esto sucede en NPs de distintos materiales como por ejemplo los resultados obtenidos por González A.L. [18] donde obtiene para NPs esféricas de diferentes tamaños y materiales las variaciones de las eficiencias ópticas de absorción y dispersión. En las gráficas para NPs esféricas de oro de la figura 4.6 se tiene un cambio bastante notable en la magnitud de sus líneas espectrales mostrando bandas similares pero de absorción y dispersión variable. Y en las gráficas para NPs esféricas de cobre de la figura 4.7 se puede ver que las bandas de las líneas espectrales son muy variados entre si según cambia el radio. Es entonces que se observa sin importar el material la variación de tamaño afecta a las eficiencias ópticas de tal manera que pueden haber más variaciones como la eficiencia

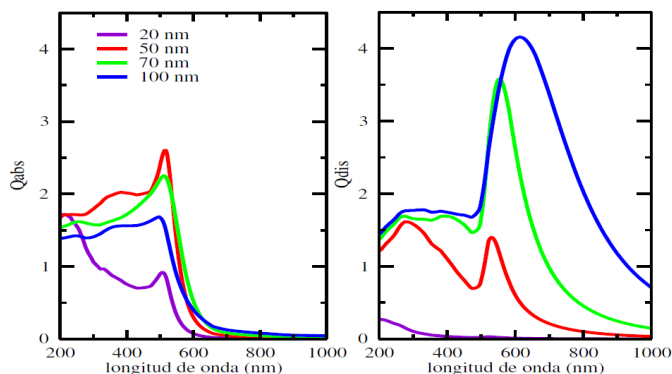


Figura 4.6: Absorción y dispersión de NP esféricas de oro en función del radio (González, 2007, Figura A.2, p. 119) [18].

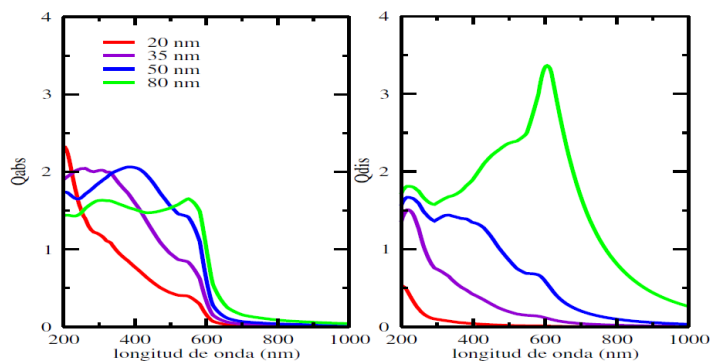


Figura 4.7: Absorción y dispersión de NP esféricas de cobre en función del radio (González, Figura A.2, p. 119) [18].

óptica de extinción o el campo cercano según cambia el tamaño. De igual manera se puede concluir que las variaciones por el tamaño son dependientes también del material de la NP.

La localización y el ensanchamiento de las resonancias mencionadas para cubos y esferas dependen de las propiedades morfológicas y físicas del sistema. De igual manera las interacciones multipolares da paso a resonancias adicionales según las propiedades del material.

Capítulo 5

Metodología

La investigación presente tiene como objetivo el simular NPs porosas de Au y Ag para obtener sus eficiencias ópticas, el efecto de presión por radiación y la intensidad de su campo eléctrico cercano. Además, se presentan múltiples factores que afectan su comportamiento como el tamaño del poro, número de poros, la forma de la NP, entre otras.

5.1. Modelado de la forma y tamaño de los poros

Para la simulación, se eligió un radio 165 nm para las NPs y un tamaño de poro entre 5 nm y 10 nm. Esta elección se debe a las características comunes que se observó en la literatura y la conveniencia de tamaño propuesta. Al examinar las figuras 1.1 y 1.2, se observa que las nanoestructuras más comunes son esferas. Las figura 1.3a y 1.3b complementa esta información al ofrecer una representación detallada de la forma y distribución de los poros.

Aunque las NPs con forma cúbica no son tan comunes como las esféricas, se eligió también simular ésta y realizar sus respectivos cálculos, ya que se son similares a las reportadas por Jiang, R y colaboradores (ver figura 1.3a c)) [5]. El comportamiento a lo largo de las aristas de esta forma proporcionara resultados interesantes en su respuesta plasmónica, así como su campo cercano. Por lo tanto, para simularlas y hacerlas similares a las esferas, se optó por un tamaño de lado de 165 nm y una distribución de poros en el rango de 5 a 10 nm.

En resumen, se seleccionó un tamaño de 165 nm de radio o lado para la simulación de NPs porosas de Au y Ag. Estas nanoestructuras presentarán en principio formas de esferas, conformadas por poros en el rango de 5 a 10 nm. Esta selección se realiza con el objetivo de permitir comparaciones con resultados experimentales y de presentar hallazgos relevantes que puedan ser de interés para futuras experimentaciones.

5.2. DDSCAT

Teniendo en cuenta nuestras consideraciones para la simulación, es fundamental explicar la herramienta principal que utilizaremos para llevar a cabo estas simulaciones. En este trabajo, se utilizó el software Discrete Dipole Scattering (DDSCAT), el cual ofrece la ventaja de haber sido ampliamente utilizado en numerosas investigaciones, demostrando ser capaz de obtener resultados que coinciden con los observados experimentalmente.

DDSCAT es un software codificado en Fortran-90 para el cálculo de dispersión y absorción de una onda EM incidente sobre un blanco con geometría arbitraria que pueden ser una partícula regular o irregular, o arreglos periódicos de partículas [24]. Este es un software de código abierto que aplica la aproximación de dipolo discreto (DDA por sus siglas en inglés). DDSCAT tiene la par-

ticularidad de poder realizar cálculos de blancos aislados, arreglos periódicos de 1 a 2 dimensiones de celdas formadas por arreglos de partículas.

El código fuente de DDSCAT implementa el método de DDA, el cual es un método general para calcular la absorción y dispersión de ondas EMs por partículas de geometría y composición arbitraria [25]. Este método lo que hace es aproximar una partícula mediante dipolos puntuales, estos son tratados como osciladores dipolares con polarizabilidad, esta última está relacionada con la constante dieléctrica de la partícula [26]; así los dipolos interactúan entre sí y con el campo incidente. Por lo que con este método mediante dipolos con cierta separación se puede realizar la simulación de una NP. El método DDA tiene la ventaja de ser flexible con respecto a las morfologías, siendo únicamente limitado por la separación dipolar d y la longitud de onda λ .

DDSCAT es una herramienta versátil ya que con el ha sido posible estudiar polvo interestelar, aerosoles atmosféricos, microorganismos marinos y arreglos de nanoestructuras [24].

DDSCAT al usar el método de DDA, da la posibilidad de realizar simulaciones de múltiples morfologías formadas por dipolos además de distintos materiales en función de la constante dieléctrica. DDSCAT cuenta con una lista de blancos con formas regulares, de manera interna genera las coordenadas rectangulares (x,y,z) de los dipolos que forman el blanco, donde x,y,z son enteros. También está la posibilidad de que el usuario pueda introducir sus propias morfologías. Estas son creadas a partir de dipolos con coordenadas (x,y,z) enteras.

DDSCAT tiene una precisión para blancos con un "parámetro de tamaño" que cumpla:

$$\frac{2\pi a_{\text{eff}}}{\lambda} \leq 25. \quad (5.1)$$

Donde a_{eff} es el radio efectivo del blanco y λ la longitud de onda incidente en el vacío [24]. El radio efectivo a_{eff} , se define como:

$$a_{\text{eff}} = \left(\frac{3V}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (5.2)$$

Donde V es volumen del material sólido de la partícula y representando el radio de una esfera de un volumen similar al de la partícula.

A la vez en DDSCAT la NP debe cumplir que el índice de refracción complejo m del material sea:

$$|m - 1| \leq 2. \quad (5.3)$$

Para una precisión numérica adecuada se debe satisfacer el siguiente criterio de la morfología a simular

$$|m|kd < 0.5, \quad (5.4)$$

donde

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (5.5)$$

Por lo que al cumplir los criterios mencionados los cálculos de DDSCAT obtendrán una alta precisión.

DDSCAT realiza cálculos de eficiencia de absorción Q_{abs} y eficiencia de dispersión Q_{sca} para blancos finitos y también realiza cálculos de:

- Eficiencia de dispersión Q_{ext} .
- Eficiencia de desfase Q_{pha} .
- Matriz 4X4 de intensidad de dispersión de Mueller.

- Vector de eficiencia de la fuerza de radiación \mathbf{Q}_{rad} .
- Vector de eficiencia de la torca de radiación \mathbf{Q}_{Γ} .

DDSCAT necesita archivos con parámetros de un formato específico, estos archivos de manera son:

- `ddscat.par`: Contiene las instrucciones de lo que va a realizar el programa con las especificaciones de los archivos subsecuentes.
- Archivo de la constante dieléctrica del material o índice de refracción del material de la NP.
- `shape.dat`: En caso de que el usuario desee su propia morfología necesita que en el archivo de este nombre sea especificada la morfología deseada mediante dipolos ubicados en coordenadas rectangulares (x,y,z).
- `ddpostprocess.par`: Archivo de entrada en caso de requerir "tracks" o secciones de la morfología para visualizar el campo eléctrico o magnético en un plano.

El archivo `ddscat.par`, además de contener instrucciones para que el programa realice los debidos cálculos, se encuentran especificaciones de las morfologías a estudiar, las longitudes de onda incidentes y el medio donde se encuentran. Una de las especificaciones de la morfología necesaria son el radio efectivo a_{eff}

Ahora dado una dispersión en una morfología, el radio efectivo mostrado en la ecuación (5.2) por el factor k de la ecuación (5.5) da como resultado de manera adimensional el "tamaño de parámetro" x :

$$x = ka_{\text{eff}} = \frac{2\pi}{\lambda} a_{\text{eff}}. \quad (5.6)$$

Este relaciona el número de dipolos (N) de la morfología y $|m|kd$ de la ecuación (5.4) de la siguiente manera:

$$x = \frac{2\pi a_{\text{eff}}}{\lambda} = \frac{62.04}{|m|} \left(\frac{N}{10^6} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot |m|kd. \quad (5.7)$$

Entonces se puede relacionar el radio efectivo de la morfología con el número de dipolos, la distancia dipolar y la onda incidente obteniendo

$$a_{\text{eff}} = 9.873 \frac{\lambda}{|m|} \left(\frac{N}{10^6} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot |m|kd. \quad (5.8)$$

Por lo que con la condición de la ecuación (5.4), para obtener cálculos precisos se debe cumplir que:

$$a_{\text{eff}} < 9.873 \frac{\lambda}{|m|} \left(\frac{N}{10^6} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (5.9)$$

Con estas condiciones, DDSCAT realiza los siguientes cálculos de manera precisa:

$$Q_{\text{abs}} = \frac{C_{\text{abs}}}{\pi a_{\text{eff}}^2}, \quad (5.10)$$

$$Q_{\text{sca}} = \frac{C_{\text{sca}}}{\pi a_{\text{eff}}^2}, \quad (5.11)$$

$$Q_{\text{ext}} = Q_{\text{abs}} + Q_{\text{sca}}. \quad (5.12)$$

Donde C_{abs} y C_{sca} son la sección transversal de absorción y la sección transversal de dispersión respectivamente, vistos en las ecuación 4.40.

Para el vector de eficiencia de la fuerza de radiación, se tiene que DDSCAT al realizar los cálculos da resultados adimensionales, pero este al ser un vector cuenta con dirección y se define a dicho vector de eficiencia como

$$\mathbf{Q}_{rad} \equiv \frac{\mathbf{F}_{rad}}{\pi a_{eff}^2 u_{rad}}. \quad (5.13)$$

Donde \mathbf{F}_{rad} es la fuerza en un tiempo promedio en el arreglo de dipolos y u_{rad} es la densidad de energía en un tiempo promedio definida como

$$u_{rad} = \epsilon_{medio} \frac{|E_0|^2}{8\pi}, \quad (5.14)$$

siendo E_0 el campo eléctrico incidente de la onda en el medio, ya mencionado en la sección 4.3.

De tal forma que con la ecuación (5.13) se puede obtener fuerza radiativa de un tiempo promedio, despejando la \mathbf{F}_{rad} de dicha ecuación se obtiene:

$$\mathbf{F}_{rad} = \mathbf{Q}_{rad} \pi a_{eff}^2 u_{rad}, \quad (5.15)$$

Además la eficiencia de presión por radiación es expresada como:

$$\mathbf{Q}_{rad} = Q_{ext} \hat{\mathbf{k}} - Q_{sca} \mathbf{g}. \quad (5.16)$$

En la cual $\hat{\mathbf{k}}$ es la dirección de propagación de la radiación incidente (para DDSCAT las ondas incidentes se propagan en dirección \hat{x}) y el vector \mathbf{g} es la dirección promedio de propagación de la radiación dispersada.

Todos estos cálculos están en el sistema cgs , aunque en su mayoría son adimensionales.

DDSCAT también permite el cálculo del campo cercano para un blanco, el campo es generado por la incidencia de una onda de longitud específica en la NP. De esta manera, el campo eléctrico \mathbf{E} de la NP se obtiene del campo eléctrico microscópico \mathbf{E}_{micro} , como se mostró en la sección 4.4. La salida del cálculo del campo eléctrico genera un archivo con múltiples intensidades del campo en cada punto del blanco. El usuario puede elegir la magnitud en los formatos $|E|$ o $|E|^2$. Con estos formatos, es posible obtener gráficamente y de manera tridimensional la intensidad del campo en cada punto o en ciertos cortes, así como una vista completa del blanco. El campo no se limita al exterior del blanco, sino que también incluye los puntos interiores del mismo.

5.3. Forma y distribución de poros en la NP

Para generar las NPs deseadas, se consideró la forma, el cómo simularlas de manera eficiente y como ir cambiando los parámetros según se desee como número de poros, tamaño o forma de la NP y los poros.

En primer lugar, se consideraron morfologías en forma de esferas y cubos para la NP. Para los poros, se notó una semejanza a canales en las nanoestructuras, por lo que los poros son la parte principal a variar para obtener las diferencias deseadas, por lo que tendrán una variación de sus parámetros. Los parámetros que se estudiaron son:

- Tamaño de poro.
- Distribución de poros.
- Número de poros.
- Material que ocupa el interior del poro.

Al tener estos parámetros y examinar las figuras, se consideró la implementación de poros de forma cilíndrica, ya que estos se asemejan a canales y son un modelo simple para representar la porosidad. La elección de poros cilíndricos proporcionó la ventaja de una manipulación más controlada debido a su simetría y también se cuenta con un mayor conocimiento geométrico de esta forma. Esto se representa en la figura 5.1

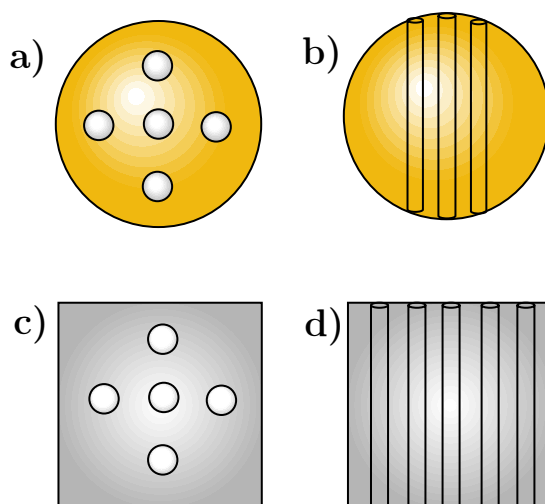


Figura 5.1: Esquema gráfico de la representación de una NP en forma de esfera y cubo con poros abiertos de forma cilíndrica; a) Esfera vista superior; b) Vista lateral de la esfera donde atraviesan los poros; c) Cubo vista superior; d) Vista lateral del cubo donde atraviesan los poros.

Con esto, fue posible simular NPs porosas con las dimensiones seleccionadas y una forma uniforme, similar a lo propuesto en la literatura. Además, se propuso de un método de simulación adecuado para realizar ajustes en los parámetros seleccionados.

Teniendo a elección la forma, se hace énfasis en la distribución, para esto se consideró tener un buen control, por ello, se optó por una distribución de poros con la que se pueda trabajar de manera que fuera adaptativa según las necesidades. Se propuso que los poros sean distribuidos de manera concéntrica a uno central, de tal manera que teniendo un poro en el centro alrededor de él estén los demás poros, como en forma de anillos. En la figura 5.2 se muestra esto:

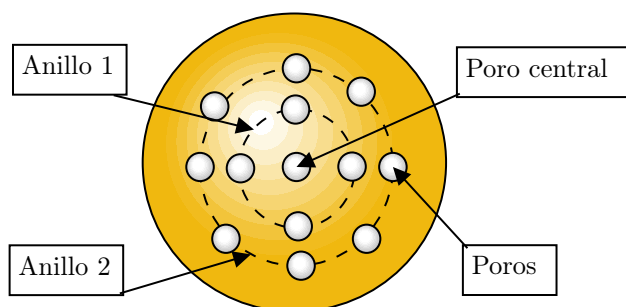


Figura 5.2: Distribución de los poros en la nanopartícula donde tiene un poro central y los demás poros están distribuidos en anillos concéntricos al poro central.

Con estas ideas es que se llegó a la abstracción y construcción de un programa que fuera posible para realizar la simulación.

5.4. Código computacional para crear el arreglo de dipolos de una NP porosa

Considerando la forma de la NP simulada, detallada en la sección 5.3, se procedió a la codificación de las morfologías propuestas y sus respectivas propiedades. En este proceso, se tomó en cuenta el software que proporcionó los cálculos de eficiencias ópticas (absorción, dispersión y extinción), presión por radiación y la intensidad del campo cercano. Para estos cálculos, se hizo uso del software DDSCAT 7.3.0.

Dado que DDSCAT emplea el método de DDA y algunos parámetros de las NPs, se consideraron los siguientes puntos en la codificación:

1. La forma de la NP discretizada por un conjunto de dipolos en un mallado tridimensional.
2. Poros discretizados por dipolos en un mallado tridimensional de dimensiones menores a la NP.
3. Ubicar a cada dipolo en un sistema de coordenadas rectangulares (x,y,z) con x, y, z números enteros.
4. Convergencia entre las coordenadas de los poros y las coordenadas de la NP de tal forma que en el conjunto de coordenadas de los poros que intersectan al conjunto de coordenadas de las NP sean los poros de la NP.
5. Diferenciar entre un dipolo del material de la NP y dipolos de los poros caracterizando a cada dipolo de la NP dependiendo del material.
6. Asegurar que no exista una superposición de dipolos.
7. Cambiar el tamaño y distribución de los poros en la NP.
8. Cálculo del volumen de la NP con poros.
9. Visualización gráfica de la NP con poros.
10. Escritura de las coordenadas y características de la NP discretizada por dipolos en archivos de salida.
11. Creación de un directorio específico al simular cada NP donde se tengan almacenados los archivos de salida.

Considerando estos aspectos, se observa que la forma adecuada de programar fue mediante el paradigma de la Programación Orientada a Objetos (POO), ya que en la POO se escriben clases basadas en objetos reales con cierto comportamiento que además las clases creadas pueden ser la base de objetos de la misma categoría [27]. Este modelo resulta adecuado, dado que las NPs porosas se pueden considerar como objetos con atributos (datos que describen al objeto o instancias de clase) y métodos (operaciones o acciones que realizan los objetos) que heredan características y comparten similitudes como un cálculo de volumen, coordenadas o dimensiones. La implementación de la POO proporcionó una base sólida para abordar los puntos mencionados anteriormente. La creación de una clase que permita la herencia de características comunes facilitó la escritura de un código limpio y flexible, es decir, un código bien documentado, ordenado y adaptable a diversos tipos de NPs con poros y con una gran versatilidad en sus características.

5.5. Programa computacional generado

Para el objetivo propuesto con las especificaciones mencionadas se pueden usar múltiples lenguajes de programación. En el proyecto planteado se usará el lenguaje de programación Python, esto es debido a que se trata de un lenguaje versátil y con múltiples librerías que pueden ser de utilidad, como, numpy o matplotlib, además Python es un lenguaje bastante eficiente, realiza funciones en menos líneas que otros lenguajes, la sintaxis permite escribir un código limpio, fácil de leer y depurar [27].

Al programar se tomarán dos principios importantes, la PEP8 que es una guía del estilo de programación de Python y como debe ir escrito el código, mostrando como debe ser la indentación, los espacios en blanco, la longitud de líneas, nombres de variables, entre otras convenciones [28] y el Zen de Python que es una colección de 19 principios a seguir para obtener un código más Pythonico, es decir, un código que implemente correctamente y de manera sencilla las herramientas de Python [29]. Ambos principios contribuyeron a obtener un código más Pythonico, haciendo que cumpla con las reglas y formatos ideales que lo hagan *simple y elegante*.

Se utilizaron las siguientes librerías y módulos de Python para la versión 3.9:

- abstractmethod (modulo de "abc")
- matplotlib (V.3.7.2) [31]
- pathlib (librería incorporada ¹)
- random (librería incorporada)
- datetime (librería incorporada)
- numpy (V.1.25.0) [30]
- shutil (librería incorporada)

También se harán usos de clases, la clases son una forma de empaquetar o clasificar atributos y métodos de un tipo de objeto. Al crear una clase, se crea un nuevo tipo de objeto, permitiendo crear nuevas instancias de ese tipo de clase, de tal forma que se puedan tener métodos y atributos característicos. Las clases permiten el encapsulamiento, herencia y polimorfismos. Por lo que una clase es la creación de un tipo de objeto, donde se tienen los métodos y atributos que puede realizar y tener un objeto.

La creación de NPs de forma esférica y cúbica en la simulación se diferencia principalmente en su forma, ya que comparten atributos similares como volumen, área y tamaño, entre otros factores inherentes a cada una. Por ello, es conveniente crear una clase llamada *Nanopartícula*, que sirva como base para la creación de las NPs a simular, independientemente de su forma, pero que contenga sus métodos. Con una clase base establecida, solo será necesario moldear la figura en la forma requerida.

Con una clase base se implementan los métodos abstractos y concretos, los métodos abstractos están definidos como aquellos métodos implementados que deben seguir las subclases de las clases base, se define su nombre y retorno de resultados, sin necesidad de un desarrollo de tal forma que las subclases tienen que implementar los métodos de la clase base, por ejemplo, una clase NP tiene un volumen y una subclase como una nanoesfera debe tener un cálculo de volumen propio, y por su parte el método concreto es ya la implementación de los métodos de tal forma que proporciona instrucciones específicas siguiendo con el ejemplo sería directamente la escritura de la fórmula para calcular el volumen de una esfera en la clase nanoesfera. En resumen, los métodos abstractos son las funciones generales que debe seguir cada instancia creada, es decir, que se defina de una manera general que es lo que requiere cada NP y el método abstracto es la implementación particular de la función deseada.

En este método concreto, se define el uso de clases abstractas y se hace un llamado a las mismas para obtener el resultado requerido. Para la simulación, los métodos abstractos a definir para la clase *Nanopartícula* son:

¹Las librerías incorporadas (también conocidas como la biblioteca estándar) en Python son módulos y funciones que vienen incluidas en el ambiente de Python

1. **Figura:** Función donde se define la forma de la NP y se almacenan sus dipolos en una matriz de puntos. Las coordenadas (x, y, z) de los puntos espaciales que forman la NP se guardan en una matriz.
2. **Poros:** Función para la creación de los poros requeridos. Las coordenadas (x, y, z) de los puntos espaciales que forman los poros se guardan en una matriz.
3. **Marcar Coincidencias:** Al tener definida la matriz de la figura y la matriz de los poros, se buscan coincidencias entre la NP y los poros en sus coordenadas mediante métodos iterativos, generando así una nueva matriz donde se marque el material de la NP y el material poroso en la NP, de tal manera que se genera una matriz de puntos (x, y, z) de la NP porosa.
4. **Graficar:** Visualización gráfica de la NP con sus respectivos poros para verificar la generación adecuada de la NP.
5. **Conteo:** Función para el cálculo del volumen de la NP, ya sea con poros o sin ellos.
6. **Archivo:** Función para la creación de un directorio específico al simular cada NP, donde se almacenen los archivos de salida, se escriban los archivos necesarios para DDSCAT y se guarden los datos obtenidos en los métodos anteriores.

Definidos los métodos abstractos en el código, se procede al método concreto en el que se accede a los métodos y atributos de la clase, en otras palabras, es la función que hace llamado a las demás para realizar las acciones en cierto orden.

Si bien se puede explicar el método concreto como el inicio del código, es adecuado ver antes como funcionan los métodos abstractos definidos.

A continuación se presenta la explicación de cada función del código.

5.5.1. Figura

Para este método abstracto no tiene otra función más que la de requerir la implementación de la figura, esta figura tiene su argumento de *medida* (un número real mayor que cero que represente ya sea el radio o longitud de lado de la figura).

Al implementar la figura esta se refiere a la forma de la NP por lo que para generarla y haber heredado de la clase *Nanopartícula* es en la creación de la clase que se implemente su método. En el apéndice A.1 y A.2 es donde se visualiza la implementación de estas figuras. Pero a grandes rasgos, es con esta función que se genera la matriz de puntos de la NP en coordenadas tridimensionales y cada coordenada se caracteriza con $(1\ 1\ 1)$ para diferenciar el material del que esta compuesta la NP.

En la implementación del método señalada se definirá varios puntos de la figura deseada al ejecutar, pero al final dará como resultado la matriz de puntos tridimensionales que conforman a la figura y un volumen preliminar calculado con la medida.

5.5.2. Marcar coincidencias

Lógicamente antes de marcar coincidencias en la figura deben generarse los poros, sin embargo, para una mejor comprensión del código y no optar por la anidación de esta función en el método que genere los poros, por conveniencia se realizó el bloque de código con exclusión para seguidamente ser llamada en la función de poros.

En este caso, lo que hace esta función es encontrar coincidencias de coordenadas tridimensionales entre los poros generados en una matriz y la matriz de coordenadas de la NP, siendo en esta última donde se encuentren las intersecciones, de encontrar coincidencia se cambia las coordenadas intersectadas y se caracterizan como $(2\ 2\ 2)$ ya que se trata de un material diferente.

Los parámetros de esta función deben ser la matriz de coordenadas de la NP y la matriz de coordenadas de los poros.

5.5.3. Poros

Los parámetros para este método son la medida de la figura, el número de poros, la matriz de coordenadas de la figura y en última instancia debido a la versatilidad del código se agregó la forma del poro.

Para la función primeramente se verifica que el número de poros se trate de un número entero, seguidamente, aunque el usuario no pueda elegir este parámetro, el tamaño del poro, en él se define un *escalamiento* con respecto al tamaño de la NP, es decir, como se denotó en la sección 5.1 los poros tienen cierto tamaño con respecto a la NP. Este escalamiento puede ser cambiado por el usuario en el código dependiendo de lo que requiera. Después de definir el escalamiento y la medida de la figura, se determina el radio o tamaño del lado del poro (según su forma) y se establece el espacio en relación con esa medida. Este espacio se utiliza para crear una malla que sirve de referencia para ubicar los poros en el espacio. Es importante resaltar que esta malla sea más extensa que las dimensiones de la propia figura para evitar posibles problemas asociados con errores en la generación. Además, se introduce un parámetro denominado *distancia*. Este parámetro define la separación deseada entre los poros de la NP.

Con los parámetros definidos se crea la malla tridimensional, donde se definen los puntos del plano de los poros, estas son puestos en una matriz con coordenadas x , y y z .

Debido a la versatilidad del código se optó por añadir la forma del poro, como se mencionó antes. Esta orden es mediante el reconocimiento de la forma requerida por el usuario como por ejemplo *"Cilindro"* o *"Cuadrado"*, cada una siendo implementada según las necesidades del usuario. Como se mencionó en la sección 5.3 se consideran a los poros como cilindro, por lo que fue la primera forma en programarse.

Para los poros en forma de cilindros y su distribución. Usando las figuras 5.1 y 5.2 como referencia, se define primeramente una función anidada (llamada *poro_indices_cilindro*) donde se realice el acomodo según el anillo y posición donde se requiera, el parámetro para la distribución según el anillo se llamó *movimiento*. Tomando en cuenta que estos anillos son concéntricos y se separan por el parámetro de la distancia el usuario puede elegir cuantos poros estén en cada uno y la posición. Con esta función es que se generan poros con una distribución estable.

Cabe recalcar que el código está hecho de tal forma que sea flexible, por lo que, si el usuario en el mismo no define el *movimiento* se tiene predeterminado que estén separados en función del anillo como

$$\text{movimiento} = \frac{\pi}{2^{(\text{anillo})}}. \quad (5.17)$$

Además de poder elegir hasta que no haya poros de tal forma que se obtiene la NP sólida según la figura y si se elige 1 poro este será de forma concéntrica a la figura.

La distribución de poros depende del usuario y puede poner los que quiera en el anillo que necesite, sin embargo, este debe asegurarse que sea de la forma correcta ya que pueden llegar a superponerse (que esto no genera fallo pero puede perder su distribución equilibrada en la figura).

Ahora teniendo definido el movimiento, se crea la variable *indices_poro* en la cual se guardan las coordenadas tridimensionales de los poros cilíndricos mediante la ecuación canónica del cilindro en el sistema coordenado tridimensional con centro (h, k, l) , la ecuación es

$$(x - h)^2 + (y - k)^2 = r^2. \quad (5.18)$$

Sin embargo, esta ecuación se modifica de tal forma que generen puntos internos para tener un cilindro sólido, siendo la ecuación ahora.

$$(x - h)^2 + (y - k)^2 \leq r^2. \quad (5.19)$$

Que escrita en Python con las variables y el cambio de posición según el anillo y movimiento es:

```

1 indices_poro = (((points[:,0] - (anillo*distancia * np.cos(i* movimiento))))**2)/ a
2 +
3               ((points[:,1] - (anillo*distancia * np.sin(i*movimiento))))**2)/ b)
               <= radio_poro**2

```

Listing 5.1: Ecuación escrita en Python para generar los poros cilindricos.

De la ecuación escrita en Python 5.1, i es el número de poro requerido y para una expansión de funcionalidad se agregaron los parámetros a y b (que de manera predeterminada tienen valor de 1) para modificar la forma del poro y asemejarla a una elipse de ser requerido.

Así teniendo nuestra función `poro_indices_cilindro` que nos da los puntos en el plano de los poros, es en la matriz de los puntos del poro donde se almacenan las coordenadas de los poros elegidos por el usuario en el espacio tridimensional con su respectiva distribución.

Finalmente usando la función de `marcar_coincidencias` se relaciona cada punto de la matriz de los puntos de poro con la matriz de puntos de la figura, de esta manera caracterizando cada poro en la figura requerida.

Como se mencionó antes se implementaron más formas del poro aparte de los cilindros. Dichas formas son el prisma cuadrangular llamada *Cuadrado* y esferas repartidas aleatoriamente en la figura llamada *Esferas_aleatorias*.

Para los prismas cuadrangulares en esencia ocupa lo mismo que los cilindros, el cambio está en su ecuación para formarlos.

Para las esferas aleatorias es un caso sencillo, ya que esta forma de poro solo necesita en principio en su ecuación generarse una esfera en algún punto de la figura de la manera aleatoria. La forma de generar estas esferas debe tomar en cuenta que los puntos donde genere la esfera deben ser enteros y tener una coordenada tridimensional. Para esto último usando la función de la biblioteca Numpy `random.randint` es que se pueden generar números aleatorios enteros en un rango, dicho rango en este caso será la medida de la figura, esto para generarlo en un espacio dentro de los límites de la NP. Si bien se pueden tener más formas de poro, para este estudio se ven más destacan las formas presentadas. El código al ser flexible tiene la oportunidad de agregar muchas más formas solo replicando ciertas líneas de código y cambiando la ecuación de la figura requerida. Por ejemplo, implementar los poros en forma de paraboloides o poros en forma de túneles curvos. Siendo así que se puede extender su funcionalidad.

5.5.4. Gráficar

Este método tiene como parámetros `grafica` que se trata de un booleano (Verdadero o Falso) y la matriz de puntos en el plano tridimensional de la figura con poros llamada `matriz_puntos_figura`. El parámetro `grafica` tiene como función de al tener un True si el usuario requiere de la gráfica de la figura y un False en caso de no requerirla. Esto último debido a que si se necesita una verificación de la forma de la NP porosa de manera gráfica. Una vez validada la instancia de la gráfica y en caso de ser True, se utiliza la biblioteca `Matplotlib` para representar la figura mediante su representación de dipolos puntuales.

5.5.5. Conteo

Para este método se tienen como parámetros, `vol` que es un booleano, la `medida` de la figura, `lamatriz_puntos_figura` y el `volumen_figura` que es el volumen preliminar de la figura generada.

Primero se verifica que se trate de un booleano el parámetro `vol`, seguidamente si se trata de True se procede al cálculo del volumen de la figura con poros y para False, se trata del caso de no requerir calcular el volumen de manera aproximada.

Para el caso del cálculo del volumen de la figura con poros, inicialmente se debe comprender la idea que sustenta este proceso. Para ilustrar este concepto, vea el diagrama 5.3, donde se representan NPs porosas repletas de esferas en el material sólido. En el inciso *a*), las esferas son de mayor tamaño, ocupando así menos espacio, mientras que en el inciso *b*), al ser las esferas más pequeñas,

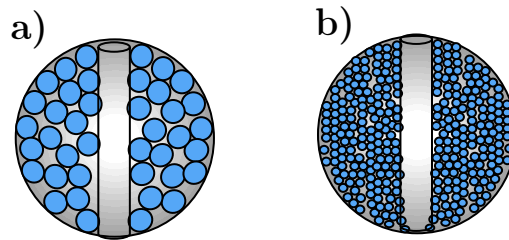


Figura 5.3: Representación del cálculo del volumen de la NP por esferas dentro de la morfología de tamaño conocido. En a) se denota el cálculo con esferas de tamaño considerable mientras que en b) se demuestra que entre más pequeñas las esferas es más refinado el cálculo.

tienen la capacidad de acomodarse en mayor cantidad. Esto sugiere que al conocer el volumen de una esfera, se puede realizar un recuento de cada esfera presente en la figura, posibilitando obtener un volumen aproximado y considerablemente más preciso, especialmente cuando las esferas son de menor tamaño en el contexto de la figura. Este tipo de cálculo de volumen tiene como ventaja que puede calcular el volumen de cualquier tipo de figura, ya sea que haya poros sobrepuestos o que no tenga una morfología consistente en sus poros. La única desventaja es que se tiene que conocer la ecuación del volumen de la figura sin poros.

Teniendo la idea del cálculo del volumen, en la fase de programación, se inicia definiendo la variable *dentro_poros* como 0, la cual representará el total de puntos dentro de la NP porosa. También se cuenta el número total de puntos en la matriz de la figura, asignándolo a la variable *total_puntos*, que se utilizará en un cálculo posterior.

Una vez establecidas las variables para las figuras, se itera a través de cada punto de la figura para determinar si dicho punto tiene un identificador de 1 en su columna número 4. Esto se realiza para identificar si se trata de material sólido de la NP. En caso afirmativo, se utiliza una variable llamada *estratificados* para indicar cuántas veces se debe iterar una formación de esferas alrededor del punto donde se encontró la coincidencia. Estas esferas se generan en un punto aleatorio dentro de una pequeña distancia (+0.05) de la coordenada de la coincidencia, lo que resulta en la creación de varias esferas pequeñas alrededor del punto de la coincidencia.

Para garantizar una generación uniforme de esferas alrededor de manera aleatoria y poco heterogénea, se importa el módulo *random* de la biblioteca estándar de Python y se utiliza su función *uniform* para generar números aleatorios de manera uniforme dentro de el rango establecido. Además, para evitar que se generen esferas fuera de la figura, se establece la condición de que estas esferas no deben sobresalir de una esfera más grande que representa la medida de la figura. Al verificar que cada esfera generada se encuentre dentro de este rango, se suma 1 al contador de la variable *dentro_poros*.

Finalmente, teniendo completo el contador *dentro_poros* del cual tuvo que haber recorrido cada punto de la figura con identificador 1, se realiza el cálculo del volumen con respecto a cuantos puntos hay en la figura entre el producto de *estratificados* por el total de puntos, y este resultado por el volumen de la figura. Es decir, la forma de obtener el volumen es mediante un conteo del porcentaje de esferas que tiene la figura de característica 1 con respecto a su volumen original. La ecuación en el programa Python se presenta en 5.2.

```
1 volumen_aproximado = (dentro_poros / (estratificados * total_puntos)) *
  volumen_figura
```

Listing 5.2: Función para el cálculo del volumen de la figura con poros

En la variable *volumen_aproximado* se almacena el resultado obtenido siendo que al final del método es retornados los valores del volumen aproximado y el volumen de la figura.

5.5.6. Archivo

Siendo el último método abstracto de la clase *Nanopartícula*, es el eje principal que une el uso de este programa con el software de DDSCAT. Este método tiene como parámetros la medida de la figura, *archivo* que se trata de un booleano, la matriz de puntos y el volumen aproximado.

En primera instancia se define una función anidada que ayude a relacionar el volumen de la figura y la NP deseada a simular, de la misma forma como se mencionó en la sección 5.2 es necesario calcular el radio efectivo (a_{eff}). La función tiene como nombre de *radio_efectivo* y en ella se hace uso de los parámetros de *medida*, *volumen* y uno definido llamado *tamaño_micrometros* el cual dará el tamaño de la NP necesaria en micrómetros.

La función *radio_efectivo* realiza primero un llamado a *tamaño_micrometros* para volverlo una instancia de clase del mismo nombre. Seguidamente con la ecuación (5.2) se calcula el radio efectivo con el volumen de la función y finalmente el radio efectivo es transformado para obtenerlo en las unidades y tamaño de la NP a simular, esta última función es una simple regla de tres que queda como:

$$a_{\text{eff}} = a_{\text{effs}} * \frac{\mu\text{m}}{\text{medida}}. \quad (5.20)$$

Ahora el método después de definir la función *radio_efectivo*, verifica el booleano *archivo*, esto por si el usuario solo requiere de la simulación, sin escribir los datos y sin guardarlos será un `False`; mientras que, si es un `True` realiza los siguientes procesos.

Se definen las variables *a_eff*, *radio_efec* y *tamaño_m* las cuales adquieren sus valores usando la función anidada *radio_efectivo*; en la cual con el conocimiento del tamaño a simular de la NP tiene como parámetros: la medida de la figura, el volumen aproximado calculado en el método *Conteo* y 0.165 como *tamaño_micrometros* (este es el radio o lado de las NP a simular mencionadas en la sección 5.1); de esta manera almacenando las variables.

Como se mencionó en la sección 5.2 un archivo donde se almacenan los datos de la NP a simular es el llamado **ddscat.par**, este archivo es importante para poder simular las NPs en DDSCAT y dicho archivo tiene cierto formato con sus debida instrucciones, para cada instrucción y la visualización del archivo vea el apéndice B. Por lo tanto para modificar dicho archivo y guardarlo en un lugar específico para cada simulación se hace uso de la importación de los módulos de Python *pathlib* y *shutil*.

Utilizando la librería *pathlib*, se genera una ruta de almacenamiento en el directorio (o carpeta) donde se guarda el código. De este modo, se crea un directorio con la función *mkdir* en la misma ubicación del archivo de código para almacenar los archivos necesarios de DDSCAT. El nombre del directorio esta dado por la generación de la figura, su tamaño para la creación de la figura, su a_{eff} , el número de poros, su forma y tamaño. Con este nombre se tiene claro que NP porosa se tiene simulada. Al crear el directorio, en este se escriben los archivos *ddscat.par*, *shape.dat* y *datos.txt*; a la vez se crea una variable llamada *Fecha* donde se almacena la fecha en la que fueron creados los archivos, esto con el módulo *datetime*. Creados los archivos *ddscat.par* y *shape.dat* se hacen los cambios correspondientes de las líneas con los datos de la simulación mencionados en los apéndices B y C donde respectivamente se introducen los datos de la simulación para el uso de DDSCAT. En el archivo *datos.txt* se hace un guardado en forma de texto del nombre del directorio, la fecha de creación con la variable *fecha*, el volumen aproximado y el radio efectivo. Este archivo no es necesario para DDSCAT pero sirve para el usuario del código rescatar datos de la simulación.

5.5.7. Método concreto: Creación

Definidos los métodos abstractos, es momento de definir el método concreto que hace llamado a los métodos abstractos. Este método lleva por nombre *creacion* y al ser utilizado requiere de los parámetros de *medida*, *poros*, *forma*, *grafica*, *vol* y *archivo*, siendo variables mencionadas en los métodos abstractos.

Este método inicialmente al correr el código da los datos de la fecha en el que se inicia una simulación y en el que termina, además de el tiempo que tardo dicha simulación en la terminal donde se ejecute el código. Este método como se mencionó hace llamado a todos los métodos abstractos explicados anteriormente, de tal manera que obtiene los resultados como una instancia específica. Por lo que básicamente hace función de los métodos abstractos para obtener los datos, resultados y archivos requeridos por cada método.

5.5.8. Implementación

Teniendo definida la clase *Nanoparticula* con sus métodos abstractos y su método concreto, se procede a la creación de las clases derivadas mediante la herencia de la clase base que en este caso es *Nanoparticula*. Estas clases derivadas usarán el concepto de herencia la cual permite hacer una reutilización de código de manera que se hereden sus métodos y atributos de la clase base. Además la herencia permite el polimorfismo, esto es que al utilizar una base con clases diferentes para responder de una manera diferente con los mismos métodos.

Haciendo uso de la clase base *Nanoparticula*, se crean las clases derivadas *Esfera* y *Cubo*; las cuales implementan en esencia la forma de la figura con la ecuación canónica de cada una ellas en el método de figura mencionado en la sección 5.5.1. La ecuación canónica de cada una respectivamente permite generar a la figura punto por punto en un mallado implementando el parámetro de *medida* y guardando a cada coordenada en una matriz. Por ejemplo, para implementar una esfera, se tiene que hacer uso de su ecuación canónica, esta es:

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2. \quad (5.21)$$

Donde x , y y z son sus coordenadas tridimensionales respectivas y r el radio de la esfera, ahora para generar a cada punto dentro de la esfera se debe usar:

$$x^2 + y^2 + z^2 \leq r^2. \quad (5.22)$$

Implementando esta ecuación como es debido, en el código da la forma de la esfera, para esto vea el apéndice A.1.

Ahora para un cubo simplemente se debe hacer cambio de su ecuación pero implementándolo de la misma manera, su ecuación es:

$$|x| \leq a, \quad |y| \leq a, \quad |z| \leq a. \quad (5.23)$$

Siendo nuevamente x , y y z sus coordenadas tridimensionales y a la mitad de la longitud de su lado. Para ver su desarrollo vea el apéndice A.2.

Finalmente implementadas las formas de la NP necesarias para el trabajo se puede proceder a realizar cada simulación. El usuario del código puede implementar más formas de ser necesario, solo se requiere tener la ecuación que genera la forma deseada. El código se encuentra disponible en un entorno virtual el cual facilita la instalación de librerías y correr el programa en la versión de Python utilizada.

5.6. Implementación de DDSCAT para simulaciones de NPs porosas

Una vez finalizadas las simulaciones con el programa desarrollado, se procede a utilizar el software DDSCAT, previamente expuesto en la sección 5.2.

En la figura 5.4 se presenta un diagrama de la metodología hasta este punto y como se relaciona el programa de NP porosas con DDSCAT

Para obtener resultados precisos con este software, es necesario que la NP a simular contenga aproximadamente 10^6 dipolos. Por lo tanto, para las esferas se utilizó un radio de 30 (no debe

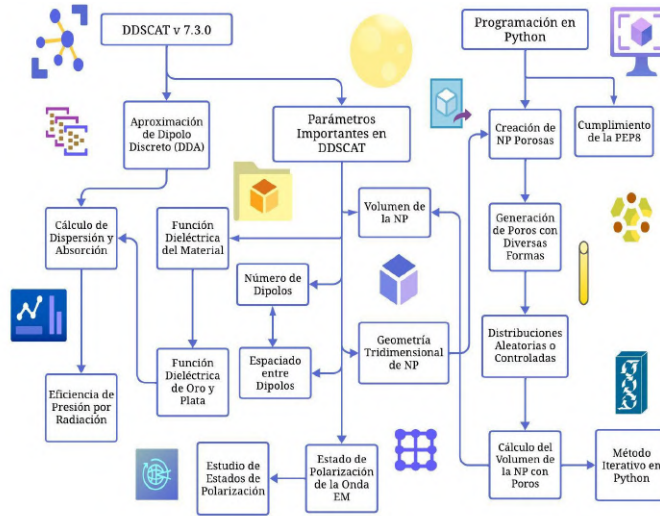


Figura 5.4: Diagrama de la metodología que muestra la relación del programa escrito en Python con su uso en DDSCAT.

confundirse con el radio de la NP a simular, que es de 165 nm), generando así un total de 113,081 dipolos. En el caso del cubo, se utilizó un lado de 60 (simulando un cubo de 165 nm de lado), lo que resulta en 226,981 dipolos. Siendo un número de dipolos que generen cálculos precisos, respectivamente.

Una vez organizadas las simulaciones con sus respectivos archivos en carpetas individuales, se ejecutó DDSCAT para llevar a cabo los cálculos requeridos.

Es importante destacar que DDSCAT es un programa que realiza múltiples cálculos simultáneamente. En una computadora convencional, estos cálculos pueden tardar demasiado tiempo o, incluso, no ser viables debido a las limitaciones de memoria. Por lo tanto, con el apoyo del Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla (IFUAP), se utilizó un servidor remoto llamado Txamula, que cuenta con DDSCAT en su versión 7.3.0 [13.05.03], con la configuración recomendada por el autor de DDSCAT.

El uso de este servidor remoto permitió cargar las simulaciones realizadas en dicho servidor, donde se ejecutó DDSCAT cada caso de NP porosa realizada. Para obtener los resultados del cálculo deseado, ya sea eficiencias ópticas, presión por radiación o campo cercano, se recomienda consultar el apéndice B, donde se explica en detalle el archivo *ddscat.par*, que contiene la configuración necesaria para cada tipo de cálculo.

Para cada NP de oro y plata y sus respectivos cálculos se utilizaron los índices de refracción reportados por Jhonson y Christy para metales nobles [33].

Una vez completada la ejecución de DDSCAT en cada simulación y verificado que los cálculos se realizaron correctamente, se procedió a descargar los archivos en la computadora del usuario desde el servidor remoto. Finalmente, se realizó una inspección de los cálculos para garantizar la ausencia de errores durante el proceso de descarga.

Capítulo 6

Resultados

Tras llevar a cabo los cálculos mediante DDSCAT, se procede a la extracción de los resultados. Estos resultados comprenden las eficiencias ópticas, la presión por radiación y el campo cercano. En cada uno de estos análisis, se consideraron varias configuraciones de las NPs. En primer lugar, se simularon NPs de oro y plata sólidas y seguidamente NP con poros llenos de aire, utilizando el aire como medio circundante. Posteriormente, se analizaron NPs con poros llenos de agua pero utilizando el vacío como medio. Además, se estudiaron NPs de oro y plata con poros llenos de agua y su medio también el agua. Dentro de estas variables, se realizaron cálculos con diferentes polarizaciones del campo EM, siendo polarizaciones paralelas o perpendiculares a los poros. Además, para cada configuración se consideraron tanto cubos como esferas, variando el número de poros en cada caso.

6.1. Simulaciones de NPs Sólidas y Porosas

Con el programa realizado se obtuvieron resultados bastante alentadores al simular NP porosas, logrando una creación de poros exacta según lo requerido.

Se realizaron simulaciones con puntos que representan dipolos puntuales en el plano con coordenadas rectangulares (x,y,z) , x , y , z enteros para esferas y cubos de 165 nm de radio y lado, respectivamente. Para las NPs porosas, se incluyeron poros cilíndricos y esféricos con las siguientes características:

- Esferas de 165 nm de radio con poros cilíndricos de $r = 5$ nm y poros esféricos de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente.
- Cubos de lado 165 nm con poros cilíndricos de $r = 5$ nm.

Cada una con el siguiente número de dipolos

- Esferas de 165 nm con 113081 dipolos puntuales.
- Cubos de lado 165 nm con 226981 dipolos puntuales.

En cada simulación, el volumen calculado mostró un error menor al 5%, siendo menor este error cuanto menos poros haya, de igual forma aumentando el número de dipolos este cálculo se vuelve más preciso pero tardado.

Las simulaciones abarcaron:

- Cubos y esferas con poros cilíndricos que varían de 5 a 45.
- Esferas con poros esféricos distribuidos aleatoriamente que varían de 13 a 80.

Cada simulación generó su propio directorio con los archivos necesarios para correr en DDSCAT, al igual que con sus respectivos parámetros.

En la Figura 6.1 muestra una representación gráfica de las NPs sólidas simuladas.

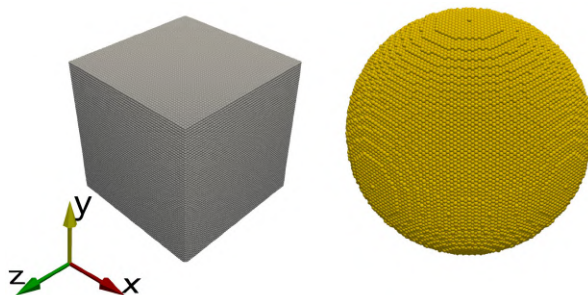


Figura 6.1: Esfera y cubo sólido discretizadas por dipolos puntuales.

Las NPs porosas mostraron una distribución de poros precisa conforme a las especificaciones, por ejemplo en los poros cilíndricos se tienen visiblemente la distribución uniforme en la NP. A continuación se presentan los resultados para las esferas y los cubos:

6.1.1. Esferas porosas

Las figuras 6.2 y 6.3 ilustran las NPs esféricas porosas simuladas.

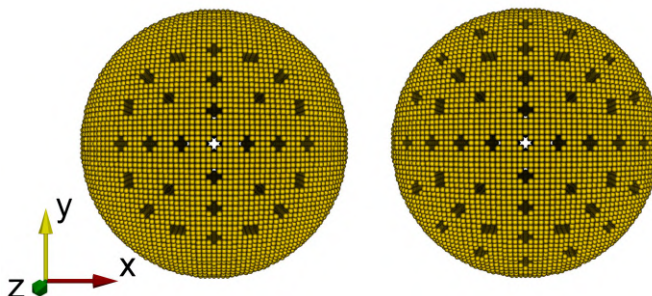


Figura 6.2: NPs esféricas discretizadas por dipolos puntuales con poros cilíndricos con distribución radial, a la izquierda se tienen 29 poros y a la derecha 45 poros.

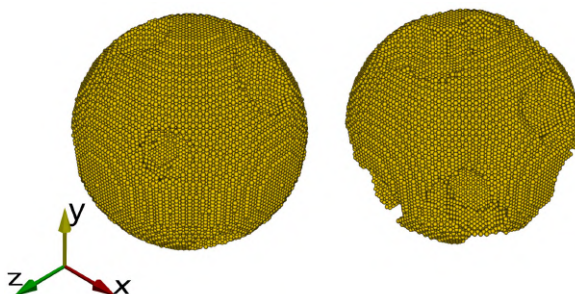


Figura 6.3: NPs esféricas discretizadas por dipolos puntuales con poros esféricos con distribución aleatoria, a la izquierda se tienen 29 poros y a la derecha 80 poros.

6.1.2. Cubos porosos

La Figura 6.4 muestra una representación gráfica de las NPs cúbicas porosas simuladas.

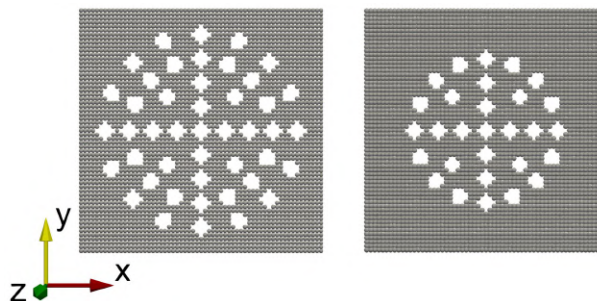


Figura 6.4: NPs cúbicas discretizadas por dipolos puntuales con poros cilíndricos con distribución radial, a la izquierda se tienen 29 poros y a la derecha 45 poros.

Comparando las NPs sólidas y porosas, se observó una diferencia en el volumen y la morfología. Las NPs porosas mostraron una menor cantidad de material debido a la presencia de poros como se muestran en las tablas 6.1 y 6.2 donde se muestra la disminución del volumen.

Tabla 6.1: NPs esféricas de radio 165 nm, porcentaje de volumen respecto al volumen de una NP sólida al tener poros cilíndricos de $r = 5$ nm distribuidos radialmente y con poros distribuidos aleatoriamente en la NP demarcados con subíndice a de $r = 41$ nm.

Num. Poros	Volumen (nm ³)	Porcentaje
1	18646027.32	99.09
5	18341654.45	97.48
13	18207447.76	96.76
29	17480998.57	92.90
45	16964988.14	90.16
29 _a	15150038.93	80.51
80 _a	10653359.03	56.62

Tabla 6.2: NPs cúbicas de lado 165 nm, porcentaje de volumen respecto al volumen de una NP sólida al tener poros cilíndricos de $r = 5$ nm distribuidos radialmente.

Num. Poros	Volumen (nm ³)	Porcentaje
1	4471377.08	99.54
5	4419080.81	98.37
13	4290127.56	95.50
29	4027541.90	89.66
45	3775895.69	84.06

Estos resultados muestran la capacidad del programa para generar NPs porosas con características precisas y controladas.

De igual forma es de destacar que al usar DDSCAT se introduce la polarización deseada, de tal forma que en este trabajo se realizaron cálculos con polarización perpendicular y paralelos a los poros los cuales están orientados en dirección \hat{z} y con una onda incidente en dirección \hat{x} con la polarización del campo eléctrico \mathbf{E} se define esto y con las etiquetas de los resultados perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros, como esquematiza la imagen 6.5.

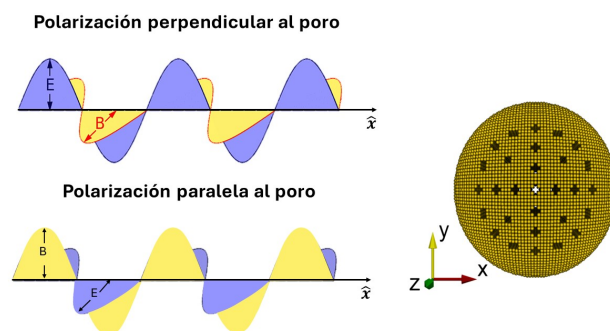


Figura 6.5: Polarización de la onda EM al incidir en la NP

6.2. Eficiencias ópticas

Las eficiencias ópticas obtenidas se dividen en dos casos: esferas y cubos. Las esferas tienen un radio de 165 nm y los cubos tienen a cada lado una longitud de 165 nm. A su vez, estos casos se clasifican según el material, siendo oro o plata. Las figuras presentadas constan de tres gráficas que muestran las eficiencias ópticas de absorción, dispersión y extinción (Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} , respectivamente), cada figura va acompañada de su respectivo análisis.

6.2.1. NPs esféricas con porosidad cilíndrica y esférica

NPs de oro

En la figura 6.6, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} para diferentes esferas de oro. Estas incluyen una esfera sólida y esferas con diferente grado de porosidad, así como distintas polarizaciones de la onda incidente en relación con el poro.

Para la figura 6.6a los poros que conforman a la NP están rellenos de aire y el medio circundante es aire, con respecto a las eficiencias ópticas se observa que al aumentar la porosidad, la absorción aumenta ligeramente en comparación con la esfera sólida y es independiente de la polarización paralela o perpendicular, especialmente en longitudes de onda mayores a 550 nm. En cuanto al espectro de eficiencia óptica de la dispersión, disminuye a medida que aumenta la porosidad en comparación con la esfera sólida, siendo más pronunciada esta disminución en la polarización perpendicular en relación con la paralela. Es importante destacar que a partir de 580 nm donde se encuentra el máximo de la banda de Q_{sca} , la dispersión disminuye en las esferas con mayor porosidad y polarización perpendicular. Por su parte, el espectro de eficiencia óptica de la extinción no muestra una variación significativa, pero en la polarización paralela aumenta con el grado de porosidad, siendo mayor cuanto mayor es el número de poros en comparación con la esfera sólida.

A pesar de las variaciones observadas entre cada tipo de esfera según su grado de porosidad, se puede notar que las tres gráficas muestran una tendencia similar con respecto a la esfera sólida pero destacando sus diferencias cuando cambia la polarización.

Para los poros rellenos de agua en la figura 6.6b se tiene que el espectro de eficiencia óptica de el espectro de eficiencia óptica de la absorción no muestra un cambio en longitudes de onda entre 300 y 450 nm en comparación de la sólida, siendo que después de 450 nm de longitud se tiene una mayor absorción según aumenta el grado de porosidad. El cambio es notable después de los 13 poros siendo mayor en los 45 poros tanto con polarización perpendicular y polarización paralela. En cuanto al espectro de eficiencia óptica de la dispersión, se observan cambios notables en su anchura a media altura (FWHM por sus siglas en inglés) donde a partir de la NP con 29 poros disminuye con respecto al aumento de la porosidad. La línea espectral con la mayor disminución de

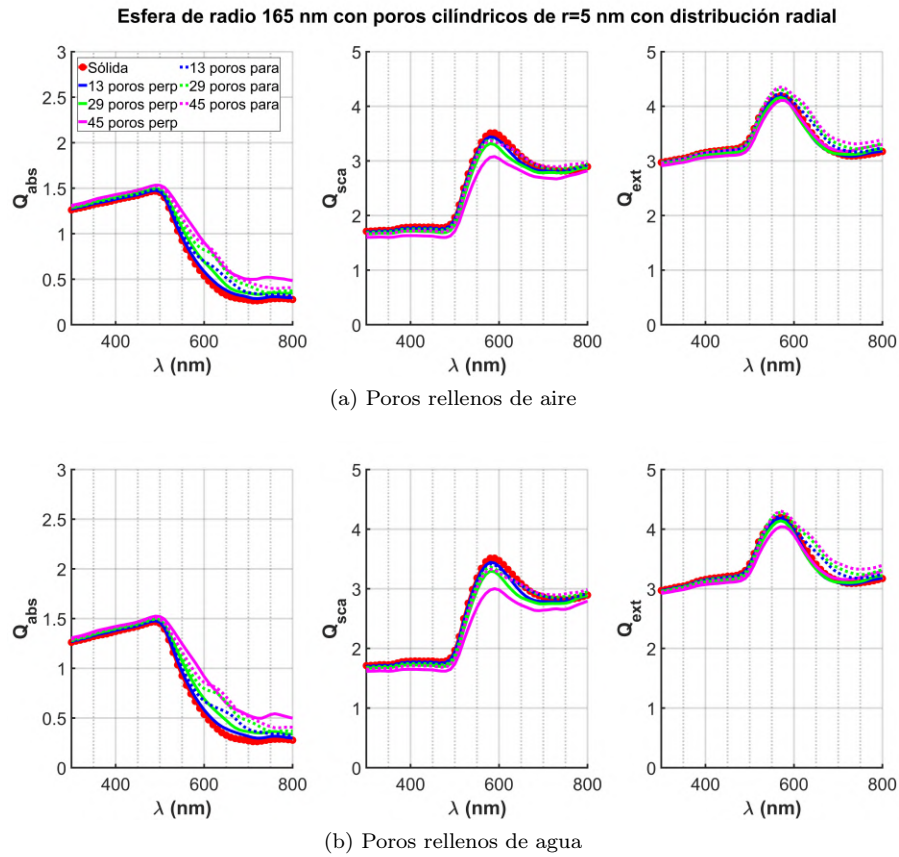


Figura 6.6: Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en la esfera varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio de la esfera es el aire.

la eficiencia óptica de dispersión corresponde a los poros con polarización perpendicular y 45 poros, sin embargo, sigue el mismo patrón de la línea espectral de la esfera sólida. Mientras tanto, las demás líneas espectrales de las NP se mantienen muy similares con la esfera sólida. El espectro de eficiencia óptica de la extinción no experimenta cambios significativos en comparación con la esfera sólida. Sin embargo, se observa un aumento en la extinción y un incremento del ancho de la banda para los poros con polarización paralela y una disminución del máximo (575 nm) de la banda del Q_{ext} y sin aumentar el ancho de la banda de extinción en los poros con polarización perpendicular. El cambio más notable ocurre a partir de los 600 nm, donde la extinción es mayor en los poros con polarización paralela en comparación con los poros con polarización perpendicular. En ambos casos, y según el grado de porosidad, las gráficas mantienen una forma similar pero cambiando FWHM.

Se identifica que las gráficas de las figuras 6.6a y 6.6b muestran un comportamiento similar diferenciándose por algunas décimas en las magnitudes de las líneas espectrales y cambios en el ancho FWHM de las banda espectral Q_{ext} por lo que se puede deducir que el material del que este relleno el poro cambia el ancho FWHM, esto puede deberse a la cantidad y el material de la NP. Además por el gran tamaño de la NP se observa que la luz dispersada es mayor que la absorbida. El máximo de la extinción se debe principalmente a la luz dispersada alrededor de 575 nm. La banda máxima observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 500 nm, es causado por las transiciones interbanda de los electrones del oro, no parece ser una resonancia

de plasmón de superficie. El plasmón generado se encuentra entre los 700 y 800 nm pero es muy débil y pequeño.

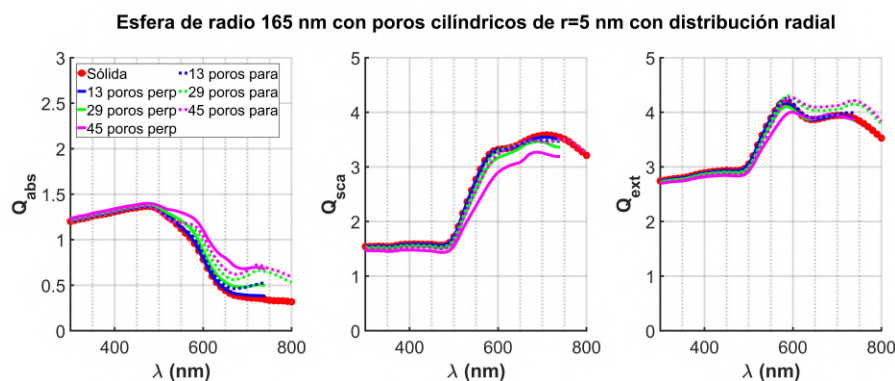


Figura 6.7: Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en la esfera varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio de la esfera es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.

En la figura 6.7, se tiene ahora el caso en el que los poros están rellenos de agua y el medio que rodea a la esfera es también agua. Siendo que para el espectro de eficiencia óptica de la absorción, se observa un cambio significativo a partir de aproximadamente los 530 nm, donde se produce un aumento en el espectro de eficiencia óptica de la absorción según el aumento de la porosidad en las esferas. Este aumento es más pronunciado en los casos de 45 poros con polarización perpendicular al poro. En cuanto al espectro de eficiencia óptica de la dispersión, se observa una disminución a partir de los 29 poros con polarización perpendicular, siendo más pronunciada esta disminución en los casos de 45 poros. Las demás esferas porosas no muestran un cambio significativo en comparación con la esfera sólida. La eficiencia óptica de extinción muestra una ligera disminución a medida que aumenta la porosidad, especialmente para los poros con polarización perpendicular, mientras que aumenta ligeramente para los poros con polarización paralela de tal forma que aparecen dos bandas en el coeficiente óptico de extinción y aumenta en el FWHM. Comparando este caso con las gráficas de la figura 6.6 se muestra que que las esferas inmersas en agua absorben ligeramente menos aproximadamente 7% y tienen un espectro de extinción y dispersión totalmente diferentes, pero se conserva el hecho de que la luz dispersada es mayor que la absorbida, esto debido al tamaño de la NP. El máximo de la extinción se debe a la luz dispersada y absorbida alrededor de 580 nm, a la vez se presenta la formación de un máximo local de la extinción alrededor de los 740 nm debido al máximo de la banda de la eficiencia de dispersión. Al igual que los otros casos se observa una banda en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 500 nm, el cual es causado por las transiciones interbanda de los electrones del oro, sin afectar el medio circundante por lo que el plasmón generado se encuentra entre los 700 y 800 nm siendo casi imperceptible por su poco realce.

En la figura 6.8, se muestran las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} de las esferas con poros cilíndricos con mayor variación en sus gráficas en comparación con la esfera sólida. Estas esferas porosas son aquellas con 45 poros y se encuentran en diferentes medios, así como con distintos rellenos para el poro. En la eficiencia óptica de absorción, se observa que antes de los 450 nm, el cambio entre las esferas no es muy pronunciado, siendo mínimas las diferencias. Sin embargo, después de los 450 nm, se comienza a notar un cambio más significativo, especialmente entre las esferas porosas y la sólida, donde se observa una mayor absorción en las esferas porosas, particularmente en la esfera con poros llenos de agua y con medio el agua. Para el espectro de eficiencia óptica de la dispersión, se observa un comportamiento similar entre los poros con polarización

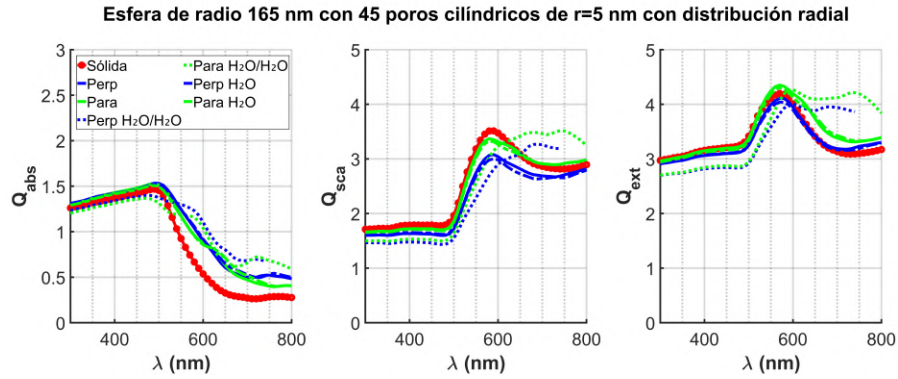


Figura 6.8: Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. La esfera tiene 45 poros y esta inmersa en diferentes medios así como diferentes rellenos de poro. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. Las esferas con (sin) etiqueta adicional H_2O representa a las esferas con los poros rellenos de agua (aire) y medio el aire, con la etiqueta H_2O/H_2O son las esferas con agua como medio y relleno de poro.

paralela y perpendicular con medio el aire, cambiando solamente la magnitud en algunos puntos, siendo menor la dispersión en comparación con la esfera sólida. Las esferas con polarización perpendicular muestran la menor dispersión. Sin embargo, en el caso de las esferas con poros llenos de agua y con medio el agua, se aprecia una pérdida en el comportamiento de una sola banda de eficiencia de dispersión, ya que no siguen la misma tendencia que las demás gráficas, sugiriendo un desplazamiento en las longitudes de onda y dos bandas en la línea espectral. En cuanto a la eficiencia óptica de extinción, se nota un comportamiento muy similar entre las líneas espectrales, decir solo una banda de eficiencia de extinción, siendo las esferas con poros, polarización paralela al poro y con aire como medio, las que muestran una mayor extinción. Por su parte, la esfera con poros rellenos de agua y en medio el agua (etiqueta H_2O/H_2O) exhiben una menor extinción y un comportamiento diferente mostrando un mayor FWHM, dos banda en el espectro de eficiencia de extinción y dos máximos locales en la línea espectral, así como un desplazamiento en su máximo.

En las figuras 6.9a y 6.9b, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} para diferentes esferas de oro con polarización en \hat{y} y \hat{z} , respectivamente. Estas incluyen una esfera sólida y esferas con diferente grado de porosidad. Los poros de estas esferas son de forma esférica y están distribuidos de forma aleatoria en la NP.

Las polarizaciones se graficaron por separado para notar el cambio a un grado de porosidad menor. En ambos casos se tienen valores muy similares entre sí en la absorción. Se observa un aumento del espectro de eficiencia óptica de la absorción conforme es mayor grado de porosidad siendo más notable a partir de la longitud de onda de 500 nm. A partir del mayor grado de porosidad que son 80 poros se muestra una mayor banda de absorción y un desplazamiento en la líneas espectral de aproximadamente 100 nm a longitudes de onda mayores así como un máximo en 600 nm. Para el espectro de eficiencia óptica de la dispersión se denota un ligero cambio entre la polarización en \hat{z} y en \hat{y} , teniendo un cambio minúsculo siendo mayor la dispersión en la polarización en \hat{y} , donde se tiene un mayor cambio es en las NPs con una gran porosidad, estas NPs son las que cuenta con 50 y 80 poros, en ambos casos el comportamiento a partir de los 600 nm siguen una tendencia de crecimiento en lugar de decrecer como la esfera sólida y las NPs con una porosidad menor a 50 poros. Finalmente, en el espectro de eficiencia óptica de la extinción para la polarización en \hat{y} y en \hat{z} no se tiene una diferencia notable entre la sólida y la distribución de poros menor a 50 poros, para las NPs con 50 y 80 poros en longitudes de onda menores a 625 nm se tiene una menor extinción a la presentada por la sólida, además de mostrar un comportamiento diferente de

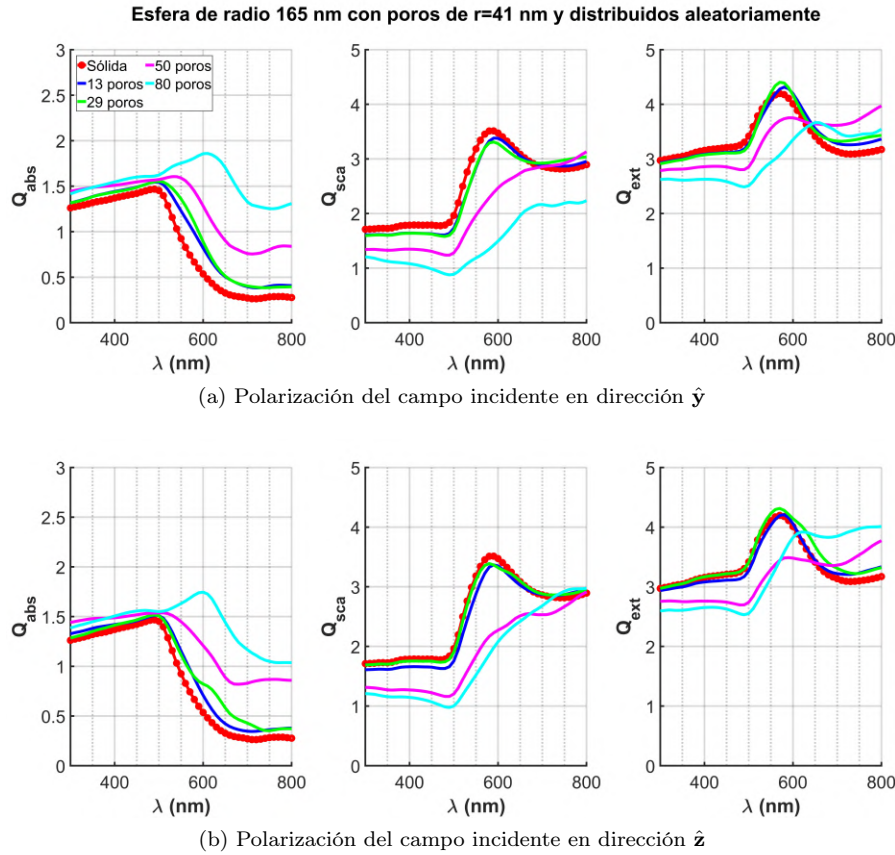


Figura 6.9: Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 13 a 80. El medio de la esfera es el aire al igual que el relleno de los poros.

la línea espectral de la esfera sólida, de tal forma que hay un aumento significativo en la FWHM.

En ambas figuras se observa un cambio notable a partir de los 50 poros, sin embargo, este cambio es debido a la degradación de la morfología, siendo que se tiene menor material en comparación de las esferas con poros cilíndricos que son más controlados.

Como se ha mencionado en ambas polarizaciones se tiene un comportamiento similar pero se caracteriza el hecho de que las NPs con 50 y 80 poros generan cierta resonancia de plasmón en ambos casos, siendo para las NPs con 50 poros alrededor de los 560 nm parece generarse un plasmón, aunque este plasmón es muy débil y tiene un realce pequeño, ahora la NP con 80 poros muestra alrededor de los 600 nm un plasmón bastante notorio y de gran tamaño así como una alta absorción en el espectro de eficiencia óptica de la absorción. De igual manera se denota que para las NPs la luz dispersada es mayor que la absorbida, y aunque con las NPs con 50 poros o más muestren una disminución en el espectro de eficiencia óptica de la dispersión, esta sigue siendo mayor al espectro de eficiencia óptica de absorción de cada una. El máximo de la banda del espectro de eficiencia óptica de extinción se debe principalmente a la luz dispersada alrededor de los 570 nm, aunque dicho máximo en las NPs de mayor porosidad se ve atenuado.

En la figura 6.10 se observa que el espectro de eficiencia óptica de la absorción tiende a aumentar con el grado de porosidad, especialmente cuando la polarización es en el eje \hat{y} . La tendencia de las gráficas a seguir la forma de la esfera sólida cambia cuando se tienen 80 poros. Los cambios más notables ocurren después de los 500 nm. El espectro de eficiencia óptica de la dispersión también se

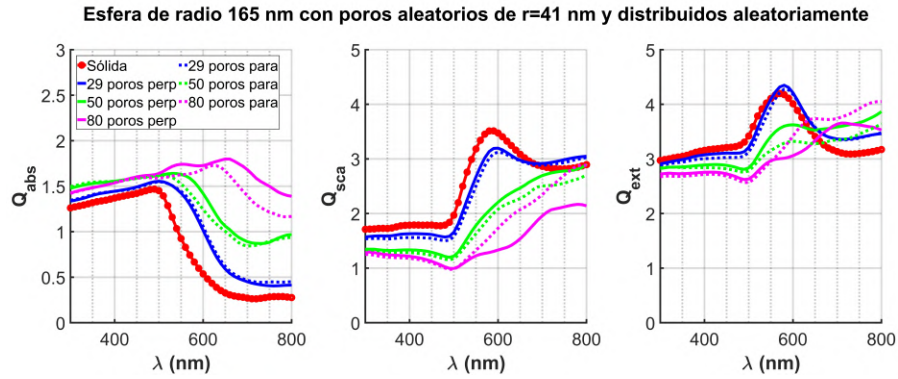


Figura 6.10: Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 29 a 80. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización en dirección \hat{y} (\hat{z}) a los poros. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de agua.

ve notablemente afectada por el aumento de la porosidad, con una disminución de la dispersión a medida que aumenta el número de poros. Se observa un cambio notable en la forma y tendencia de las gráficas cuando se tienen 80 poros, perdiendo su similitud con la esfera sólida. Este fenómeno también se observa en los casos de 50 poros, aunque en menor medida, tanto para la polarización en el eje x como en el y en comparación con la esfera sólida. Por su lado el espectro de eficiencia óptica de la la extinción, aunque no experimenta cambios significativos, se ve afectada por el aumento de porosidad, mostrando una ligera disminución. Se observa un desplazamiento del máximo en los casos de 80 poros, junto con una reducción en la magnitud.

Se caracteriza al igual que las gráficas de la figura 6.9 que las NPs con 50 y 80 poros generan cierta resonancia de plasmón, siendo para las NPs con 50 poros alrededor de los 550 nm parece generarse un plasmón, aunque en este caso plasmón es ligeramente mayor a sus contra partes y tiene un realce mayor, ahora la NP con 80 poros muestra alrededor de los 650 nm un plasmón que muestra un máximo muy amplio de alrededor de 50 nm siendo entonces muy grande su FWHM. Para las NPs la luz dispersada es mucho mayor que la absorbida, y las NPs con 50 poros o más muestren una disminución en la dispersión, pero aún así el espectro de eficiencia óptica de la dispersión es mayor que su absorción. El máximo del espectro de eficiencia óptica de extinción se debe principalmente a la luz dispersada alrededor de los 570 nm, al igual que el mostrado en las gráficas 6.9a y 6.9b, aunque dicho máximo en las NPs de mayor porosidad se ve igualmente atenuado.

En la figura 6.11, las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} tienen el siguiente comportamiento. La eficiencia óptica de absorción, tiene un cambio significativo a partir de los 500 nm, donde se incrementa el espectro de eficiencia óptica de la absorción a medida que aumenta el número de poros en la NP. Además, a partir de los 29 poros, se empieza a tener una pérdida de la tendencia de la línea espectral en comparación con la línea espectral de la esfera sólida. Por su parte la eficiencia óptica de dispersión, muestra un cambio significativo después de los 29 poros, siendo una menor dispersión a medida que aumenta el grado de porosidad. Es notable el comportamiento de los 80 poros en la disminución de la dispersión, mientras que los 29 poros muestran un comportamiento más similar a la esfera sólida, esto tanto para la polarización del campo incidente \hat{y} como para la polarización \hat{z} . Por lo que el cambio del medio y del material del poro genera un comportamiento distinto en las líneas espectrales. Se observa nuevamente que la luz dispersada es mayor que la absorbida debido a las dimensiones de la NP. En cuanto a la eficiencia óptica de extinción, se observa una disminución respectiva al aumento en el número de poros en la NP, siendo más pronunciada esta disminución para los 80 poros. Sin embargo, los 29 poros muestran

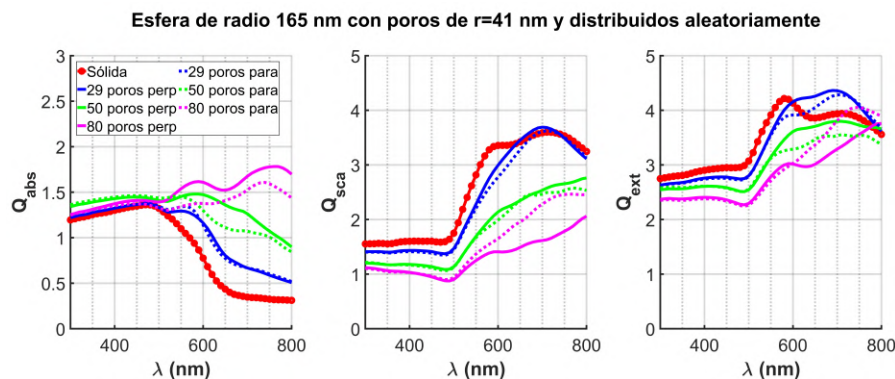


Figura 6.11: Esfera de oro con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 29 a 80. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización en dirección \hat{y} (\hat{z}) a los poros. El medio de la esfera es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.

un comportamiento particular, con un desplazamiento en su máximo y un aumento después de los 600 nm, tanto para la polarización del campo incidente \hat{y} como para la polarización \hat{z} . Notemos que en las NPs porosas se pierde el máximo de la banda del espectro de eficiencia óptica de extinción debido al máximo de la eficiencia óptica de dispersión que tiene una amplitud muy grande, además de volverse muy ancho su FWHM. La NP con 80 poros genera una banda observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 750 nm, este es causado por la degradación de la NP, aunque parece ser una resonancia de plasmón de superficie. El plasmón generado para las demás NP se encuentra alrededor de los 650 nm pero es muy débil y pequeño.

Entonces, observando las esferas de oro, se aprecia que, a pesar de tener distinta polarización, en su mayoría las eficiencias ópticas son similares. Cuando la porosidad es baja, las propiedades ópticas muestran un comportamiento y resultados muy parecidos a los de la NP sólida. A partir de las esferas con 13 poros, se empieza a notar una tendencia de aumento en el espectro de eficiencia óptica de la absorción y una disminución en el espectro de eficiencia óptica de la dispersión y extinción. Aunque las esferas con 45 poros cilíndricos son las más porosas y presentan diferencias respecto a la NP sólida, esta diferencia es relativamente pequeña, siguiendo aún el comportamiento de la línea espectral de la NP sólida.

Para las esferas con poros distribuidos aleatoriamente, se observan cambios significativos en sus eficiencias ópticas en NPs con más de 29 poros. Sin embargo, estos resultados implican una degradación del material y una falta de control sobre las NPs, lo que dificulta identificar la razón de estos resultados.

Por otro lado, ahora comparando las NPs con poros rellenos de aire y las NPs con poros rellenos de agua, ambas en un medio de aire, muestran un comportamiento muy similar. Esto sugiere que el relleno de los poros no cambia significativamente sus propiedades debido a la alta actividad del material sólido, que es el oro. Las NPs con poros rellenos de agua en un medio igual de agua presentan un desplazamiento hacia la derecha de su línea espectral. Este desplazamiento se atribuye al medio, aunque el cambio no es muy pronunciado.

NPs de plata

En la figura 6.12, se muestran las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} de diversas esferas de plata, que incluyen una esfera sólida y esferas con diferentes grados de porosidad. El medio que rodea a las NPs es el aire. En las gráficas de la figura 6.12a se tiene que la eficiencia óptica de absorción, se observa que no hay un cambio significativo en la forma de las gráficas, ya que la

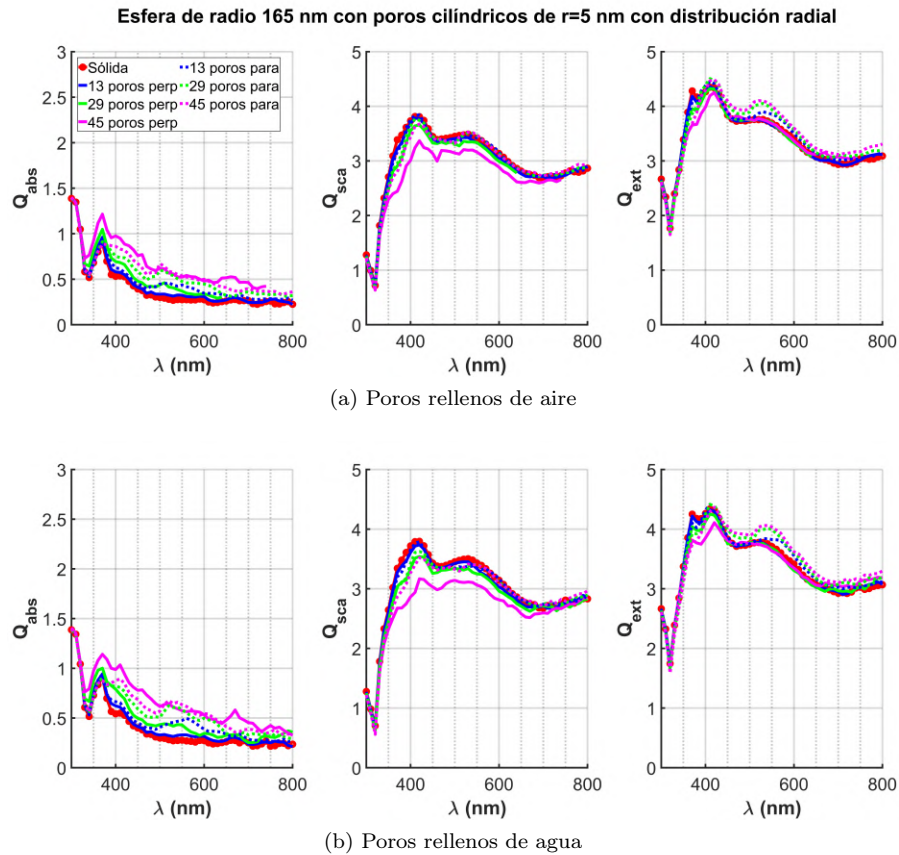


Figura 6.12: Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en la esfera varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio de la esfera es el aire.

línea espectral de las esferas porosas es similar a la línea espectral de la esfera sólida. Sin embargo, se destaca un aumento en el espectro de eficiencia óptica de la absorción a medida que aumenta el número de poros. Es interesante notar que los poros con polarización perpendicular muestran una mayor absorción en comparación con sus contrapartes, y no se observa un desplazamiento en los máximos. Por su parte en la eficiencia óptica de dispersión, se nota que todas las líneas espectrales siguen un comportamiento similar a la de la esfera sólida. A pesar de la porosidad de la mayoría, no se observan cambios significativos, excepto en el caso de la esfera con 45 poros con polarización perpendicular de la onda incidente, que muestra una dispersión notablemente menor que la esfera sólida después de los 350 nm, aunque antes son muy similares. En cuanto a la eficiencia óptica de extinción, se aprecian cambios mínimos. Antes de los 375 nm, se observa una eficiencia de extinción ligeramente menor, pero luego aumenta en comparación con la esfera sólida. Los poros con polarización paralela de la onda incidente muestran un espectro de eficiencia óptica de extinción ligeramente mayor en comparación con los poros con polarización perpendicular de la onda incidente.

Un punto a destacar en el caso de la plata es en gran medida la estructura presentada con múltiples bandas, esto es debido a la función dieléctrica de la plata la cual tanto su parte real e imaginaria de su índice de refracción complejo en cada longitud de onda tienen valores diferentes de tal forma que tiene un comportamiento en el que el índice de refracción es creciente al aumentar la longitud de onda y una tendencia a 0 para el coeficiente de extinción al aumentar la longitud de

onda.

En la figura 6.12b, se muestra que la eficiencia óptica de absorción de las esferas porosas con poros rellenos de agua tiene un comportamiento similar en las líneas espectrales, con la línea espectral de la esfera sólida. Sin embargo, se nota un aumento del espectro de eficiencia óptica de la absorción a medida que aumenta el número de poros, siendo la esfera con 45 poros la que más absorbe. Además, se observa que las esferas con polarización paralela al poro tienen un máximo local alrededor de 550 nm, mientras que las demás lo tienen alrededor de 670 nm. En cuanto a la eficiencia óptica de dispersión, se observa una ligera disminución a medida que aumenta la porosidad de las esferas. Sin embargo, la esfera con 45 poros con polarización perpendicular de la onda incidente al poro es la que muestra una mayor disminución en su dispersión, aunque sin perder el patrón de la esfera sólida pero de tal forma que hay un ensanchamiento en el FWHM. Para la eficiencia óptica de extinción, no se observan patrones muy distintos de las líneas espectrales de las esferas porosas en comparación con la línea espectral de la esfera sólida. La única diferencia significativa es que la esfera con 45 poros muestra un máximo menor de la banda alrededor de los 420 nm en comparación con las demás líneas espectrales. Además, se nota que las esferas con polarización paralela experimentan un aumento superior en el espectro de eficiencia óptica de la extinción en comparación con las esferas con polarización perpendicular.

Comparando las gráficas 6.12 y 6.12b se percibe que no se tiene un cambio significativo entre ellas, siendo lo más destacable que las bandas generadas por las NPs con poros rellenos de agua son ligeramente más suaves que los de las NPs con poros rellenos de aire. Se observa que la luz dispersada es mayor que la luz absorbida a partir de los 500 nm, sugiriendo que en UV las NPs absorban mucho más. Mientras que el espectro de eficiencia óptica de la extinción tiene un máximo de la banda causado por el máximo de la banda del espectro de eficiencia óptica de dispersión alrededor de los 420 nm. La banda observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 370 nm a primera vista parece ser el plasmón, sin embargo se tiene que es debido transiciones interbanda de los electrones de la plata, un posible plasmón generado pero que se nota muy débil y atenuado es el observado alrededor de los 770 nm.

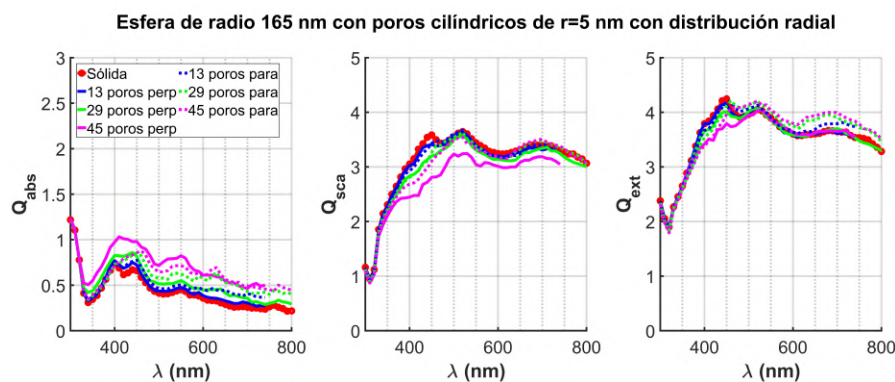


Figura 6.13: Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en la esfera varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio de la esfera es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.

En la figura 6.13, se muestran las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} de esferas con poros llenos de agua, y el medio que las rodea es igualmente el agua. Se observa que el espectro de eficiencia óptica de la absorción aumenta en función del número de poros, siendo que los poros con polarización paralela muestran un mayor aumento en comparación con los poros con polarización perpendicular de la onda incidente, excepto para los 45 poros con polarización perpendicular, los cuales muestran la mayor absorción en comparación con la esfera sólida. Se destaca también

que las líneas espectrales de las NPs porosas siguen el mismo patrón que la línea espectral de la esfera sólida. Ahora en relación con la dispersión, se observa que entre las gráficas se mantiene el mismo patrón que la esfera sólida, con resultados muy similares entre sí. La esfera de 45 poros con polarización perpendicular es la más destacada, mostrando una menor dispersión en comparación con las demás. En cuanto a la eficiencia óptica de extinción, se tiene que el cambio entre las líneas espectrales es mínimo, pero se destaca que la esfera con 45 poros y polarización perpendicular es la que menos absorbe, mientras que las esferas con polarización paralela muestran un ligero aumento en el espectro de eficiencia óptica de la extinción después de los 450 nm en comparación de las demás gráficas.

Observando las gráficas de la figura 6.12 y comparando con las gráficas de la figura 6.13 se tiene un cambio particular entre ellas ya que las líneas espectrales de la absorción de la NP en agua muestran un corrimiento de 50 nm a la derecha, además las bandas generadas por las NPs con poros y medio el agua son más suaves que los de las NPs inmersas en aire. Se observa que la luz dispersada es mayor que la luz absorbida. Mientras que el espectro de eficiencia óptica de la extinción tiene dos máximos de banda similares que difieren muy poco en magnitud uno seguido de otro causados por el máximo de la banda del espectro de eficiencia óptica de dispersión alrededor de los 450 nm y de los 520 nm. La banda observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 420 nm a primera vista parece ser el plasmón, sin embargo nuevamente es debido transiciones interbanda de los electrones de la plata pero inmerso en agua debido al corrimiento de la longitud, aunque un posible plasmón generado pero que se nota muy pronunciado pero de baja intensidad es el observado alrededor de los 550 nm.

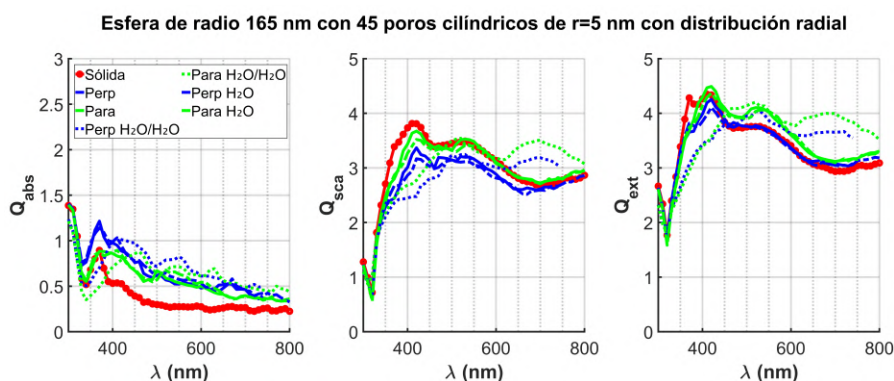


Figura 6.14: Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. La esfera tiene 45 poros y esta inmersa en diferentes medios así como diferentes rellenos de poro. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. Las esferas con (sin) etiqueta adicional H_2O representa a las esferas con los poros rellenos de agua (aire) y medio el aire, con la etiqueta H_2O/H_2O son las esferas con agua como medio y relleno de poro.

En la figura 6.14, se muestran las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} de las esferas de plata con mayor variación en sus gráficas en comparación con la esfera sólida. Estas esferas son aquellas con 45 poros y se encuentran en diferentes medios, así como con distintos rellenos para el poro. En la eficiencia óptica de absorción se observa un comportamiento similar entre las esferas porosas y la esfera sólida, sin embargo, se nota un aumento en la absorción por parte de las esferas porosas. Las esferas de 45 poros con polarización perpendicular y poros rellenos de aire con medio igualmente el aire, así como la esfera con poros rellenos de agua con medio el aire, muestran una mayor eficiencia óptica de absorción en comparación con sus contra partes con polarización paralela. Además, las esferas con poros llenos de agua y medio de agua presentan un desplazamiento de su línea espectral de alrededor de 50 nm en su máximo, con una absorción mayor después de los 400 nm. Respecto

al espectro de eficiencia óptica de la dispersión, se nota que es menor en las esferas con poros en comparación con la esfera sólida. Además, después de los 600 nm, las esferas con poros llenos de agua y medio de agua aumentan esta dispersión, generando un máximo. Mientras tanto, las demás gráficas muestran un comportamiento similar a la esfera sólida, siendo las esferas con polarización perpendicular las que tienen menos dispersión. En cuanto a la eficiencia óptica de extinción, se observan cambios significativos y notables en las esferas con poros llenos de agua y medio de agua, presentando un desplazamiento en su máximo y un aumento del espectro de eficiencia óptica de la extinción alrededor de los 700 nm. Por otro lado, las demás gráficas muestran un comportamiento similar a la esfera sólida. Se destaca que las esferas con polarización paralela tienen una mayor extinción que las esferas con polarización perpendicular.

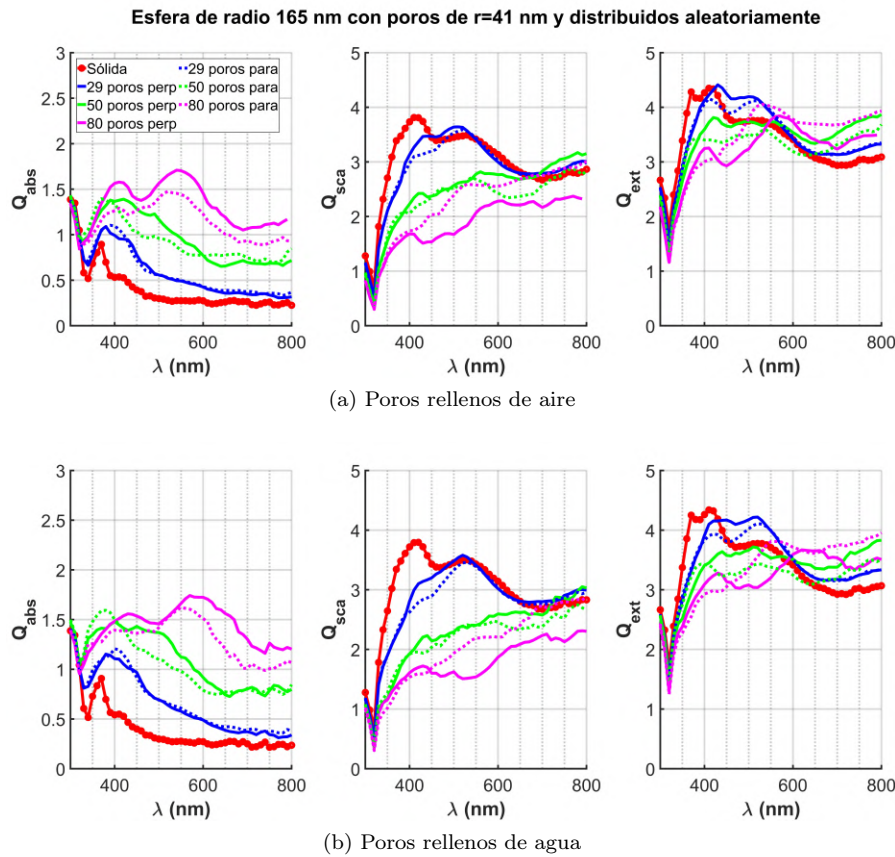


Figura 6.15: Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 29 a 80. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización en dirección \hat{y} (\hat{z}) a los poros. El medio de la esfera es el aire.

En la figura 6.15, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} para varias esferas de plata, que incluyen una esfera sólida y esferas con diferentes grados de porosidad. Los poros en estas esferas son de forma esférica y están distribuidos de manera aleatoria en la NP cada esfera esta rodeada por el aire. En primer lugar cuando los poros están rellenos de aire, vea las gráficas de la figura 6.15a, en la eficiencia óptica de absorción se observan cambios significativos a medida que aumenta la porosidad. En las esferas con 80 poros, la línea espectral no sigue la misma forma que la línea espectral de la esfera sólida, mostrando incluso un aumento adicional en el espectro de eficiencia óptica de la absorción a 475 nm. Las esferas con menos poros se comportan de manera

similar a la esfera sólida, pero con una absorción mayor. La eficiencia óptica de dispersión muestra un comportamiento particular. Las líneas espectrales de las esferas con poros no siguen un patrón similar al de la esfera sólida, siendo muy distintas entre sí. Sin embargo, a medida que aumenta la porosidad, disminuye la dispersión. La esfera con 80 poros con polarización paralela de la onda incidente al eje y de la esfera muestra la menor dispersión y un ensanchamiento en su FWHM. Para la eficiencia óptica de extinción, se notan cambios más marcados. Antes de los 450 nm, el espectro de eficiencia óptica de la extinción es menor en las esferas con poros, pero después de este punto, se observa un aumento mayor, y las líneas espectrales correspondientes no siguen la forma de la esfera sólida. Además, el máximo está desplazado y los hombros son menos pronunciados.

En la figura 6.15b que son las NPs con los poros rellenos de agua, se presenta en la eficiencia óptica de absorción, un cambio en las gráficas a partir de los 50 poros, donde, aunque sigue aumentando la absorción, se pierde el patrón que sigue línea espectral de la esfera sólida. Específicamente para los 50 poros, tanto con polarización perpendicular como paralela, muestran una disminución en el espectro de eficiencia óptica de la absorción después del primer máximo. En contraste, las esferas de 80 poros, tanto con polarización perpendicular como paralela, muestran la mayor absorbancia, generando además otro máximo de banda relativo alrededor de los 600 nm, más pronunciado en los 80 poros con polarización perpendicular de la onda incidente. En relación con la eficiencia óptica de dispersión, su principal característica es que disminuye a medida que aumenta la porosidad. Sin embargo, también se observa que, a medida que aumenta la porosidad, las líneas espectrales pierden el patrón de la línea espectral de la esfera sólida, mostrando una forma diferente. Además, no se aprecia una concordancia clara entre las líneas espectrales de las esferas porosas y la línea espectral de la NP sólida, además de mostrar una pérdida de la banda alrededor de 500 nm en las esferas con 50 y 80 poros. Para la eficiencia óptica de extinción, se observan cambios más marcados sin un patrón regular. A medida que aumenta la porosidad, disminuye la extinción, siendo esta disminución más notable después de los 350 nm para las esferas con poros y alrededor de los 600 nm para las demás esferas porosas. Después de estas longitudes de onda, se registra un aumento de el espectro de eficiencia óptica de la extinción en comparación con la esfera sólida. Es importante destacar que no se cuenta con un patrón regular entre las líneas espectrales pero si mostrando un aumento en sus FWHMs.

Comparando las gráficas de las figuras 6.15a y 6.15b se identifica que tienen comportamientos muy similares entre si a tal grado que se diferencian principalmente y únicamente porque las esferas con poros rellenos de agua tienen una línea espectral más suave, al ser tan parecidas se tiene que en ambos casos que debido al tamaño de la NP la luz dispersada es mayor que la absorbida. El máximo de el espectro de eficiencia óptica de la extinción es difícilmente notable debido al comportamiento atenuado que presenta en el espectro de eficiencia óptica de dispersión, siendo principalmente grande con NPs poco porosas. La banda observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 370 nm, se debe principalmente a transiciones interbanda de los electrones de la plata, mientras que se observa que en las NPs con poros se comienzan a formar plasmones siendo el más llamativo el generado por la NP con 80 poros y polarización perpendicular de la onda incidente, de tal forma que genera el plasmón alrededor de los 600 nm pero este resultado no es tan fiable ya que para ese grado de porosidad la NP esta muy degradada.

En la figura 6.16 se tienen las gráfica para el caso en que los poros están llenos de agua y la esfera está rodeada por agua con poros distribuidos aleatoriamente en la NP. Se observa que el espectro de eficiencia óptica de la absorción sigue la tendencia de aumentar con el número de poros, y las líneas espectrales no experimentan una pérdida significativa de forma en comparación con la esfera sólida. La esfera de 80 poros muestra otro máximo local alrededor de los 700 nm y con un FWHM notable, en comparación con el único máximo formado en cada línea espectral. En relación con el espectro de eficiencia óptica de la dispersión, se observa que sigue el comportamiento de que a mayor porosidad, menor dispersión, siendo notable la disminución entre las gráficas. Sin embargo, a partir de los 50 poros, se pierde el patrón que sigue la esfera sólida, y las líneas espectrales muestran un comportamiento diferente, cambiando la forma de la gráfica. En cuanto a la extinción, se observa un comportamiento particular. Antes de los 500 nm, las líneas espectrales

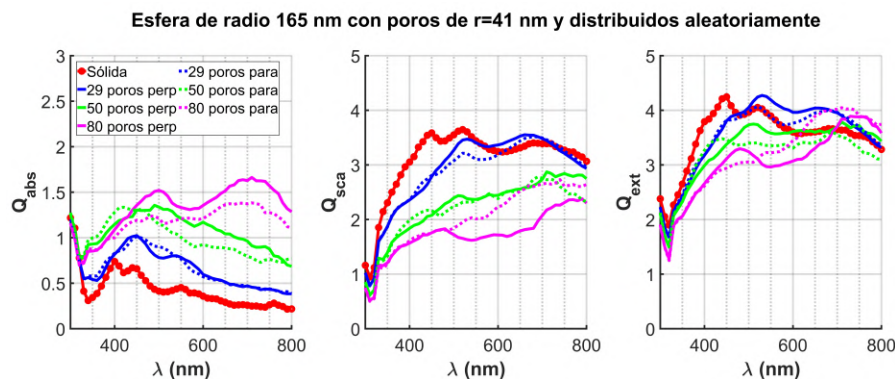


Figura 6.16: Esfera de plata con radio 165 nm y poros de forma esférica de radio $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente en la NP. El número de poros en la esfera varía de 29 a 80. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización en dirección \hat{y} (\hat{z}) a los poros. El medio de la esfera es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.

muestran una concordancia en sus comportamientos, y a medida que aumenta la porosidad, el espectro de eficiencia óptica de la extinción tiende a disminuir. Sin embargo, se observa que las esferas con 29 poros, tanto paralelos como perpendiculares, tienen una extinción mayor que la esfera sólida. Este fenómeno se repite para los 80 poros después de los 600 nm, pero los 50 poros no muestran un aumento significativo en la extinción.

Las líneas espectrales de las NP porosas de la figura 6.16 son muy parecidas a las líneas espectrales de la figura 6.15 pero para las NPs inmersas en agua se tiene un cierto corrimiento de alrededor de 100 nm a la derecha, sin embargo, se observa un comportamiento interesante y es que debido a las transiciones interbanda de la plata algunos comportamientos de las líneas espectrales se conservan. Ahora aunque el comportamiento sea el mismo se tiene que el plasmón de la NP con 80 poros se desplazo a alrededor de los 700 nm.

En las esferas de plata, se observan líneas espectrales con bandas variadas indican una estructura muy rica debido a la función dieléctrica del material. Con distintas polarizaciones de la onda incidente, las eficiencias ópticas varían, mostrando un ligero aumento en el espectro de eficiencia óptica de la absorción con la polarización paralela al poro. Curiosamente, en la esfera con 45 poros y polarización perpendicular, se mantiene la mayor absorción y menor extinción y dispersión. Ante baja porosidad, las propiedades ópticas son similares a las de la NP sólida. A partir de las esferas con 13 poros, hay una tendencia al aumento de el espectro de eficiencia óptica de la absorción y una disminución en el espectro de eficiencia óptica de la dispersión y extinción. Las esferas con 45 poros cilíndricos, aunque más porosas, presentan diferencias pequeñas respecto a la NP sólida, siguiendo el comportamiento de la línea espectral de esta última.

Para las esferas con poros distribuidos aleatoriamente, se notan cambios significativos en las eficiencias ópticas, más marcados en las NPs con mayor porosidad. Estos resultados implican una degradación del material y una falta de control sobre las NPs, evidente en la débil relación entre la línea espectral de la NP de plata sólida y las NPs con poros distribuidos aleatoriamente. Estas NPs no se asemejan visualmente a una esfera de plata.

Comparando las NPs con poros rellenos de aire y de agua, ambas en un medio de aire, muestran un comportamiento similar pero con algunas diferencias. Aunque hay cambios, estos no son muy significativos, sugiriendo que el relleno de los poros no altera las propiedades. Las NPs con poros rellenos de agua con medio el agua presentan un desplazamiento hacia la derecha de su línea espectral, similar al caso del oro. Este desplazamiento, atribuido al medio, no es muy pronunciado, y si se compararan las líneas espectrales de las NPs en aire, se obtendrían resultados muy similares

entre si.

6.2.2. NPs cúbicas con porosidad cilíndrica NPs de oro

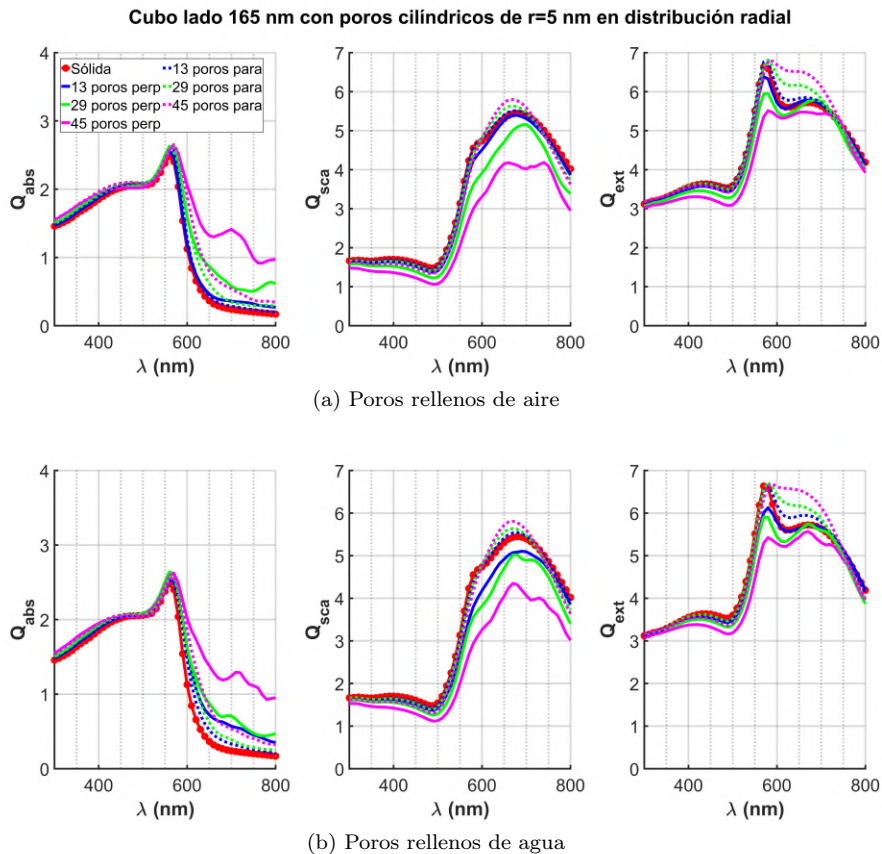


Figura 6.17: Cubo de oro de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en el cubo varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio del cubo es el aire.

En la figura 6.17, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} para varios cubos de oro. Estas incluyen un cubo sólido y cubos con diferentes grados de porosidad. Los poros en estos cubos son de forma cilíndrica, cada NP esta inmersa en aire. Para los poros rellenos de aire de la figura 6.17a se tiene que la eficiencia óptica de absorción, muestra que las líneas espectrales de cada cubo poroso siguen un comportamiento similar a las líneas espectrales del cubo sólido en longitudes de onda menores a 600 nm. Entre los poros con polarización perpendicular de la onda incidente y polarización paralela de la onda incidente de el cubo, se muestra que los cubos con 45 poros tienen una mayor absorción, especialmente el cubo de 45 poros con ondas incidentes de polarización perpendicular al poro, que presenta un máximo local en los 700 nm en comparación con los demás cubos. De manera general, se observa que al aumentar la porosidad en los cubos, el espectro de eficiencia óptica de la absorción también aumenta, siendo mayor cuando la polarización de la onda incidente es perpendicular al poro. En cuanto a la eficiencia óptica de dispersión, se observa que las líneas espectrales de las NPs siguen el mismo comportamiento pero con diferentes magnitudes al cubo sólido. La dispersión en los cubos con poros y polarización perpendicular muestra una menor

dispersión en comparación con el cubo sólido. Por su parte, los cubos con polarización paralela presentan una extinción ligeramente mayor que el cubo sólido. Aproximadamente a los 675 nm, las NPs con polarización paralela al poro tienen un máximo de mayor magnitud que el cubo sólido. Además, el cubo con 45 poros y polarización perpendicular al poro presenta su máximo atenuado en los 700 nm en comparación con la línea espectral del cubo con 29 poros y la misma polarización que presenta un máximo más pronunciado. Finalmente, para la eficiencia óptica de extinción, las líneas espectrales siguen un comportamiento similar al del cubo sólido pero difiriendo su magnitud, destacándose que las líneas espectrales de los cubos con poros y polarización perpendicular tienen una magnitud menor en comparación con el cubo sólido. A 575 nm, las NPs con poros y polarización paralela al poro muestran un comportamiento muy similar, incrementando la línea espectral de la extinción considerablemente hasta los 750 nm, donde todas las NPs siguen el mismo patrón a longitudes de onda mayores.

Ahora para los cubos con poros rellenos de agua con gráficas de la figura 6.17b, en la eficiencia óptica de absorción, se observa que las líneas espectrales de cada cubo poroso siguen un comportamiento similar al de la cubo sólido para longitudes de onda menores a 575 nm. Entre los poros con polarización perpendicular de la onda incidente y paralelos al cubo, se muestra que los cubos con 45 poros tienen una mayor absorción, especialmente el cubo de 45 poros con ondas incidentes de polarización perpendicular al poro, que presenta un máximo local en los 700 nm en comparación con los demás cubos. De manera general, se observa que al aumentar la porosidad en los cubos, el espectro de eficiencia óptica de la absorción también aumenta, siendo mayor cuando la polarización de la onda incidente es perpendicular al poro, los poros con polarización de la onda incidente paralela a los poros a pesar de aumentar la absorción no es igual de notable que las demás. Ahora, en cuanto a la eficiencia óptica de dispersión, se observa que las líneas espectrales de las NPs siguen el mismo comportamiento pero con diferentes magnitudes al cubo sólido. El espectro de eficiencia óptica de la dispersión en los cubos con poros y polarización perpendicular expone un comportamiento de una disminución a medida que aumenta la porosidad, siendo de tal manera que que el cubo con 45 poros genera un máximo menos extendido en λ y un hombro en la longitud de onda de 725 nm. el cual se ve de igual manera en el cubo con 29 poros pero este menos prominente. Por su parte, los cubos con polarización perpendicular presentan una extinción ligeramente mayor que el cubo sólido. Aproximadamente a los 675 nm, las NPs con polarización paralela al poro tienen un máximo de mayor magnitud que el cubo sólido. Para la eficiencia óptica de extinción, las líneas espectrales siguen un comportamiento similar al del cubo sólido pero difiriendo su magnitud, se muestra que los cubos con polarización perpendicular hay una disminución evidente en su magnitud a medida que aumenta la porosidad, esto hasta la longitudes de onda mayores a 720 nm donde se tiene valores similares en el espectro de eficiencia óptica de la extinción con el cubo sólido. Por su lado las NP con poros con polarización paralela muestran valores muy similares con el cubo sólido sin importar su porosidad, esto entre los 300 y 575 nm, y en longitudes de onda mayores a 700 nm. Siendo esto último que no se cumple entre los 575 nm y 700 nm donde se denota un aumento de la extinción según la porosidad, además de extender el máximo a más longitudes de onda a medida que aumenta la porosidad de tal forma que aumenta significativamente su FWHM.

Observando detalladamente las gráficas de las figuras 6.17a y 6.17b se puede deducir que el relleno del poro no afecta pronunciadamente a las eficiencias ópticas de las NPs cúbicas de oro, ya que solo se observan cambios muy ligeros en algunos bandas que se suavizan, pero fuera esos puntos las líneas espectrales respectivas de cada NP se comportan prácticamente igual. Se observa que la luz dispersada es mayor que la luz absorbida a partir de longitudes de onda mayores a 550 nm, sugiriendo que a longitudes de onda cortas las NPs absorban mucho más. Mientras que la extinción tiene una banda máxima principal causada por el máximo de la bands de el espectro de eficiencia óptica de absorción y el aumento del espectro de eficiencia óptica de la dispersión alrededor de los 570 nm. La banda observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 570 nm a primera vista parece ser el plasmón característico de los cubos, un posible plasmón generado solamente se presenta en la NP con 45 poros y con polarización perpendicular, esto alrededor de los 700 nm.

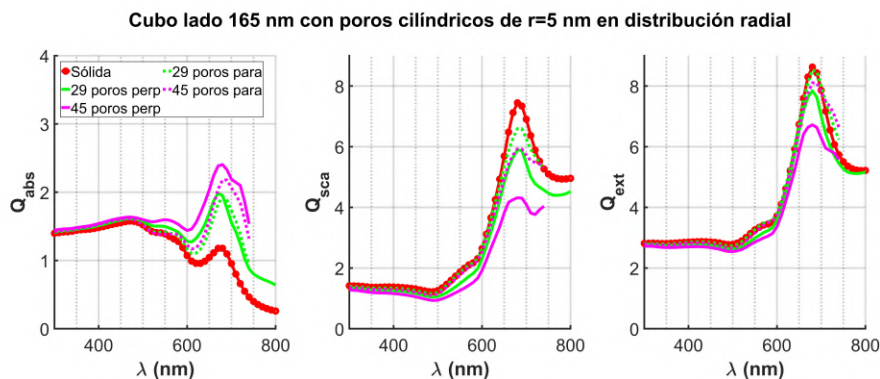


Figura 6.18: Cubo de oro de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en el cubo varía de 29 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio del cubo es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.

En la figura 6.18, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} para varios cubos de oro. Estas incluyen un cubo sólido y cubos con diferentes grados de porosidad. Los poros en estos cubos son de forma cilíndrica, cada uno relleno de agua y los cubos están rodeados por agua. En la eficiencia óptica de absorción, se observa que las líneas espectrales de cada cubo poroso siguen un comportamiento similar al de la cubo sólido para longitudes de onda menores a 500 nm. Entre los poros con polarización perpendicular de la onda incidente y paralelos al cubo, se muestra que los cubos con 45 poros tienen una mayor absorción, especialmente el cubo de 45 poros con ondas incidentes de polarización perpendicular al poro. De manera general, se observa que al aumentar la porosidad en los cubos, el espectro de eficiencia óptica de la absorción también aumenta, siendo mayor cuando la polarización de la onda incidente es perpendicular al poro, los poros con polarización de la onda incidente paralela a los poros muestran un aumento similar pero con una ligera disminución en la magnitud. Se recalca que comparando con las respectivas gráficas de las figuras 6.17a y 6.17b se muestra un corrimiento de las gráficas con respecto a las longitudes de onda, siendo que los máximos de las líneas espectrales de las gráficas se encuentran alrededor de 575 nm en comparación del máximo presentado en 675 nm del cubo inmerso en agua con poros rellenos de agua. En cuanto a la eficiencia óptica de dispersión, se observa que las líneas espectrales de las NPs siguen el mismo comportamiento pero con diferentes magnitudes al cubo sólido. La dispersión en los cubos con poros y polarización perpendicular expone un comportamiento de una disminución del espectro de eficiencia óptica de la dispersión a medida que aumenta la porosidad, siendo de tal manera que que el cubo con 45 poros genera una parábola entre la longitud de onda de 700 y 725 nm. Por su parte, los cubos con polarización perpendicular presentan una extinción ligeramente menor que el cubo sólido, siendo que la NP mas porosa de 45 poros toma valores muy similares con el cubo con 29 poros y polarización perpendicular. Para la eficiencia óptica de extinción, las líneas espectrales siguen un comportamiento similar al del cubo sólido. Se observa que los valores para el espectro de eficiencia óptica de la extinción entre las líneas espectrales son similares entre si hasta los 650 nm donde comienzan a diferir. Se muestra que los cubos con polarización perpendicular tienen una disminución evidente en su magnitud a medida que aumenta la porosidad, esto hasta la longitudes de onda de 750 nm donde se tiene nuevamente valores similares en la extinción con el cubo sólido. Por su lado las NP con poros con polarización paralela muestran valores muy similares con el cubo sólido sin importar su porosidad, siendo que solo en la NP con 45 poros una disminución mayor pero no comparable con el su homologó con polarización perpendicular, esto entre los 650 y 750 nm.

Comparando a cada una de estas gráficas con las respectivas gráficas de las figuras 6.17a y 6.17b

se nota un corrimiento en las gráficas de la eficiencia de absorción de la figura 6.18, esto debido al cambio de medio de las NPs. Sin embargo en estos casos es de destacar que se observa que la luz dispersada es mayor que la absorbida en todos los casos. El máximo de la banda del espectro de eficiencia óptica de extinción se debe principalmente además de la luz dispersada, al máximo del espectro de eficiencia óptica de absorción. La banda observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 570 nm para NPs inmersas en aire y 670 nm para NPs inmersas en agua muestra el corrimiento de la línea espectral. No se observa la generación de otro plasmón de superficie más allá del posible que se genera en el máximo del espectro de eficiencia óptica de la absorción.

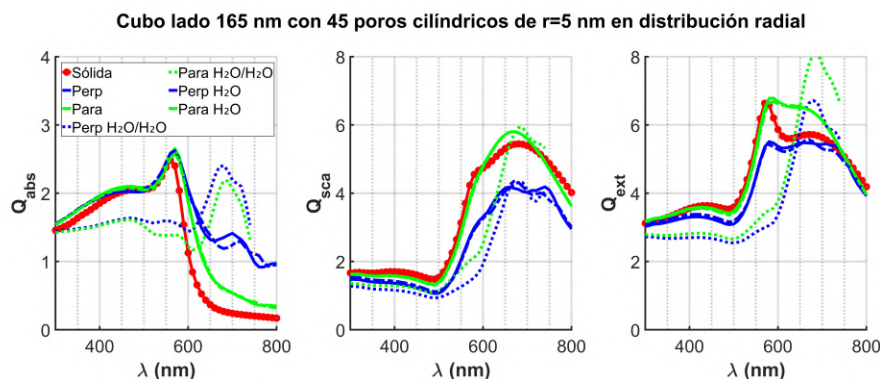


Figura 6.19: Cubos de oro de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El cubo tiene 45 poros y esta inmerso en diferentes medios así como diferentes rellenos de poro. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. Los cubos con (sin) etiqueta adicional H_2O representa a los cubos con los poros rellenos de agua (aire) y medio el aire, con la etiqueta H_2O/H_2O son los cubos con agua como medio y relleno de poro.

En la figura 6.19, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} con mayor cambio presentado, esto es para cubos de oro con 45 poros, y como punto de comparación un cubo sólido. En el espectro de eficiencia óptica de la absorción se muestra inicialmente un comportamiento y valores similares entre las líneas espectrales de las NPs con medio el aire en las longitudes de onda menores a 575 nm, donde seguidamente las NPs con medio el aire y polarización perpendicular siguen valores similares entre si, siendo ligeramente menor la absorción en las NPs con poros rellenos de agua, ambos comparado con el cubo sólido muestran una mayor absorción presentando un máximo local alrededor de 700 nm. Por su parte las NPs con medio el aire y polarización paralela muestran una mayor absorción al cubo sólido pero menor en comparación a los cubos con polarización perpendicular, estos cubos no presentan un crecimiento del espectro de eficiencia óptica de la absorción como su contraparte. Con los cubos con su medio el agua se muestra una ligera disminución en el espectro de eficiencia óptica de la absorción en comparación del cubo sólido, además, sus líneas espectrales muestran un corrimiento de aproximadamente 100 nm, siendo esto provocado por el medio circundante. En el caso de la dispersión se muestran que las líneas espectrales de las NPs tienen un comportamiento estable, siendo ligeramente diferentes pero con valores similares entre si. Las NPs con polarización perpendicular muestran valores y comportamientos muy similares entre si, siendo que tienen una dispersión menor y siendo ligeramente menor para los cubos con poros rellenos de agua y el medio el agua. Por su lado las NPs porosas con polarización paralela muestran una mayor dispersión a la sólida en el intervalo de longitudes de onda de 600 nm a 700 nm, siendo que en las demás longitudes de onda tienen un comportamiento similar a la sólida, solo el cubo con poros relleno de agua y medio el agua muestra valores diferentes a sus homólogos siendo que tiene una menor dispersión entre las longitudes de onda de 500 nm y 650 nm. Entonces se muestra que sin importar el relleno del poro o el medio

del cubo la dispersión será igual siendo diferente solo por el número de poros y la polarización de la onda incidente con la NP, aunque el medio también influye no lo hace tan marcado como los factores mencionados. Para la eficiencia óptica de extinción se observa que las NPs con medio el aire y polarización paralela tienen valores muy similares al cubo sólido en longitudes menores a 575 nm, donde a longitudes de onda mayores muestran un aumento en el espectro de eficiencia óptica de la extinción con un máximo que no decae pronunciadamente antes de los 700 nm donde a longitudes de onda mayores vuelve a tomar valores similares al cubo sólido, ambos cubos con poros rellenos de aire y poros rellenos de agua muestran valores casi iguales, diferenciándose por milésimas. Las NPs con medio e aire y polarización perpendicular al igual que sus contrapartes tienen valores muy similares difiriendo solo en algunos puntos donde uno y otro son mayores, su extinción en comparación de la sólida es menor y muestran además la menor extinción en su punto máximo, siendo que solo son similares en comportamiento. Por su parte los cubos con poros rellenos de agua y medio el agua al igual que la eficiencia óptica de absorción tiene un corrimiento de su línea espectral, además de mostrar una mayor extinción, siendo que el máximo de la NP con polarización perpendicular muestra un máximo de igual magnitud al cubo sólido mientras que el cubo con polarización paralela tiene un máximo con magnitud mucho mayor.

Para los cubos de oro, se aprecia que, a pesar de tener distinta polarización, en su mayoría las eficiencias ópticas son similares, excepto en los cubos con 45 poros, donde se observa una gran diferencia en sus eficiencias. Los cubos con 45 poros y polarización perpendicular se desvían significativamente de la línea espectral de la NP sólida, mientras que el cubo con 45 poros con polarización paralela muestra valores muy cercanos a la NP sólida. En cuanto a la porosidad, cuando esta es baja, las propiedades ópticas de las NPs muestran un comportamiento y resultados muy similares a los de la NP sólida, con diferencias ligeramente apreciables a longitudes de onda mayores a 600 nm. A partir de los cubos con 29 poros, se empieza a notar una tendencia de aumento en el espectro de eficiencia óptica de la absorción y una disminución en el espectro de eficiencia óptica de la dispersión y extinción, aunque dicho aumento es significativo solo en las NPs con 45 poros, ya que la diferencia en el cubo con 29 poros es mínima.

Los cubos con 45 poros, aunque son los más porosos, presentan diferencias respecto a la NP sólida que son pequeñas entre los 300 y 600 nm de longitud de onda. A mayores longitudes de onda, se observa un aumento marcado en la absorción, generando otro máximo local alrededor de los 700 nm. En cuanto a la extinción, las diferencias no son tan notables en todo el espectro, mientras que el espectro de eficiencia óptica de la dispersión muestra una disminución y una banda menos pronunciada en su máximo en comparación con las demás NPs.

Comparando las NPs con poros rellenos de aire y las NPs con poros rellenos de agua, ambas en un medio de aire, se observa un comportamiento muy similar con cambios menores que, aunque no sean grandes, pueden ser notables. Esto sugiere que el relleno de los poros cambia ligeramente las eficiencias ópticas, pero no en un grado significativo, lo que podría deberse a la morfología o al material de la NP. Las NPs con poros rellenos de agua en un medio también de agua presentan un desplazamiento hacia la derecha de su línea espectral, además de una ligera disminución en la absorción y un máximo mayor en la extinción. Esto indica un cambio marcado al introducir la NP en agua, comparada con las que su medio es aire.

NPs de plata

En la figura 6.20, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} para varios cubos de plata. Estas incluyen un cubo sólido y cubos con diferentes grados de porosidad. Los poros en estos cubos son de forma cilíndrica y los cubos están rodeados por aire. Para los cubos con poros rellenos de aire en la eficiencia óptica de absorción se muestra un comportamiento bastante distintivo que muestra en gran medida la diferencia que generan las líneas espectrales al aumentar el número de poros en los cubos. En principio se observa que las curvas muestran muchas bandas y variaciones entre sí. Las NPs menos porosas, los cubos con 13 poros, muestran valores de absorción muy

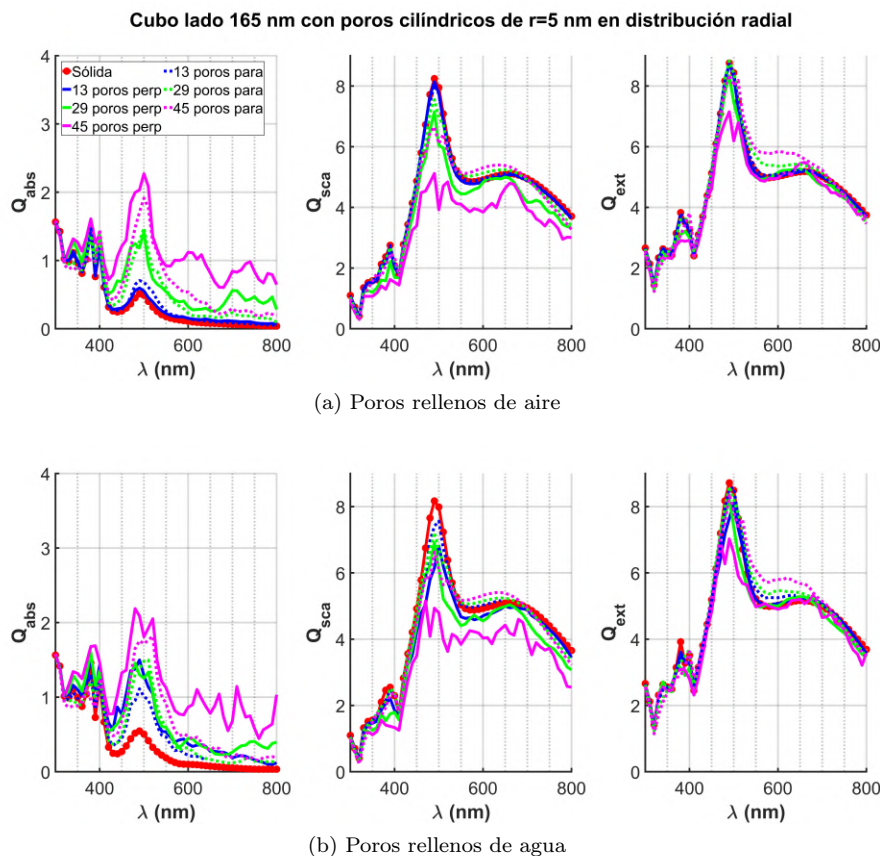


Figura 6.20: Cubo de plata de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en el cubo varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio del cubo es el aire.

similares con el cubo sólido y entre sí, sin importar el tipo de polarización de la onda incidente. Para las NPs con un mayor número de poros se tiene una mayor absorción siendo que en los cubos con 29 poros muestran una mayor absorción en comparación de la NP sólida, además de mostrar entre los cubos de 29 poros que la distinción es mínima ante una diferente polarización, aunque, se tiene una absorción ligeramente mayor con las NPs con polarización perpendicular. Los cubos con 45 poros a pesar de tener líneas espectrales con valores muy similares con el cubo sólido entre los 300 y 400 nm de longitud de onda, muestran a longitudes de onda mayores una diferencia notoria al cubo sólido, siendo un aumento en su absorción, en especial en su máximo, además de generar múltiples bandas con amplitud diferente, en especial la NP con 45 poros y polarización perpendicular, que muestra en diferentes longitudes de onda estas bandas. La línea espectral con 45 poros y polarización paralela muestra menos bandas y un comportamiento más estable. En la segunda gráfica de la figura se muestra la eficiencia óptica de dispersión, la cual inicialmente muestra el comportamiento de disminuir la dispersión a medida que aumenta la porosidad. Siendo que las NPs con 13 poros sin importar la polarización de la onda estas tienen valores muy similares al cubo sólido; y para los cubos con 29 poros de igual forma sin importar la polarización de onda muestra que sus líneas espectrales siguen un comportamiento similar al cubo sólido pero con menor magnitud siendo que muestran una menor amplitud en sus bandas y un máximo de menor magnitud, aunque en ciertas longitudes se nota una mayor dispersión en las NPs con polarización paralela. En última instancia los cubos con 45 poros muestran diferencias entre sí, siendo los

valores que se caracterizan de manera diferente ante diferentes polarizaciones. El cubo con 45 poros y polarización paralela muestra una disminución en el espectro de eficiencia óptica de la dispersión y con valores muy similares al cubo con 29 poros y polarización paralela, de tal manera que el comportamiento es más estable. Y de cierta manera se tiene que la línea espectral que tiene el cubo con 45 poros y polarización perpendicular muestra un comportamiento único entre las demás NP, siendo que cuenta con más bandas, menor amplitud de ellos y un máximo con una magnitud muy reducida en comparación de las demás NPs. Para la eficiencia óptica de extinción a pesar de mostrar una gran diferencia entre si en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, ahora muestra comportamientos más estables y similares entre si. Difiere la NP con 45 poros y polarización perpendicular a los valores de las demás líneas espectrales entre los 450 y 525 nm de longitud de onda, ya que se observa una disminución en la extinción, siendo que se tiene un máximo de magnitud menor a los demás. Se muestra de igual forma que entre 525 nm y 675 nm los cubos con 29 y 45 poros y con polarización paralela muestran un ligero aumento en la extinción. Para longitudes de onda mayores a 700 nm se obtienen resultados similares entre las NPs porosas y el cubo sólido.

En la figura 6.20b, se presentan los cubos porosos, con poros rellenos de agua. En primera instancia, la gráfica de la eficiencia óptica de absorción muestra diferentes comportamientos entre las NPs de tal manera que un comportamiento generalizado sería un aumento del espectro de eficiencia óptica de la absorción a medida que aumenta la porosidad de la NP, siendo que las NPs con polarización perpendicular tienen una mayor absorción que en comparación de las NPs con polarización paralela. Viendo este comportamiento se analiza de igual forma que las NP con 13 y 29 poros con polarización perpendicular tienen valores muy similares entre si, caso contrario con las NP con 13 y 29 poros con polarización paralela que muestran un valores distintos pero un comportamiento similar entre si de tal manera que el cubo con 29 poros presenta una mayor absorción. Con estas diferencias en magnitudes también se denota que estas NP sus líneas espectrales siguen un comportamiento muy similar entre si, presentando su máximo alrededor de la longitud de onda de 500 nm. Ahora la NP con mayor absorción presentada es el cubo con 45 poros y polarización perpendicular, ya que además de que su línea espectral tiene valores con mayor absorción y su banda máxima sea la mayor, presenta múltiples bandas en longitudes de onda mayores a 600 nm mostrando una mayor absorción en ciertos puntos además de un comportamiento distintivo, por su parte la NP con 45 poros y polarización paralela si presenta una mayor absorción a las demás NP pero no comprable con su contraparte, además, muestra un comportamiento más apegado a las NP con 29 poros. Por su parte, la eficiencia óptica de dispersión se muestra un comportamiento estable ya que las líneas espectrales de las NP porosas son muy similares a la línea espectral de la NP sólida, siendo que difieren en una disminución según aumenta el número de poros, se nota un cambio notable únicamente en el cubo con 45 poros y polarización perpendicular, de tal forma que esta tiene la menor dispersión además de mostrar una banda máxima muy opacado, de tal forma que su línea espectral cuenta con múltiples bandas con una disminución de la dispersión y una línea espectral muy rica. Para la eficiencia óptica de extinción nuevamente como en el comportamiento de la gráfica correspondiente de la figura 6.20a, se tiene que el espectro de eficiencia óptica de la extinción para todas las NP tiene un comportamiento muy similar entre si, destacando que entre 475 y 525 nm el cubo con 45 poros y polarización perpendicular muestra un máximo menor a las demás siendo que tiene disminución de la extinción. Por otro lado entre los 500 y 700 nm se nota un aumento de extinción en las NP con polarización paralela de tal forma que esta aumenta en función del número de poros, aunque este aumento no es tan grande.

En las gráficas de las figuras 6.20a y 6.20b se visualiza que el relleno del poro afecta moderadamente a las eficiencias ópticas de las NPs cúbicas de plata siendo notoriamente en el espectro de eficiencia óptica de la absorción para NPs con 45 poros, además para las demás líneas de absorción se observan cambios muy ligeros en algunas bandas que incrementan su magnitud por ejemplo la NP con 13 poros rellenos de agua alrededor de los 500 nm, pero fuera esos puntos las líneas espectrales respectivas de cada NP se comportan muy similar entre si. La luz dispersada nuevamente es mayor que la luz absorbida, debido al tamaño de la NP. La extinción tiene un máximo de la banda

principal causado por el máximo del espectro de eficiencia óptica de la absorción y el el máximo del espectro de eficiencia óptica de la dispersión alrededor de los 500 nm. La banda observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 500 nm a primera vista parece ser el plasmón, siendo que también puede ser debido transiciones interbanda de los electrones de la plata así como por su morfología, un posible plasmón generado solamente se presenta en la NP con 45 poros y con polarización perpendicular, esto alrededor de los 600 nm y otro generado tanto por las NPs con 29 y 45 poros con polarización perpendiculares encuentra alrededor de los 720 nm .

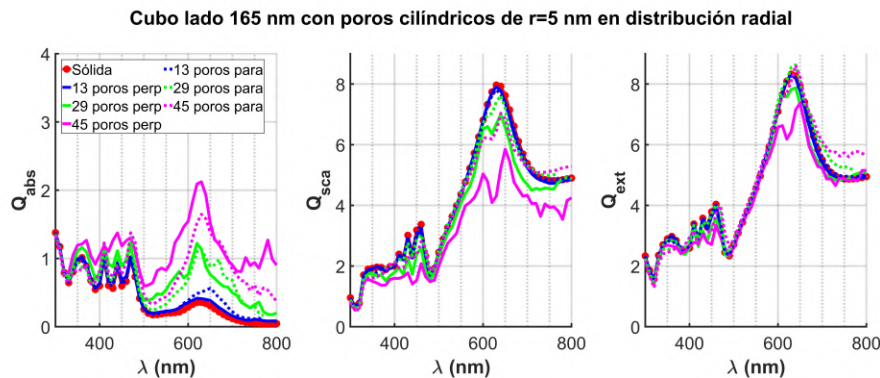


Figura 6.21: Cubo de plata de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El número de poros en el cubo varía de 13 a 45. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. El medio del cubo es el agua y los poros igualmente están rellenos de agua.

En la figura 6.21, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} para varios cubos de plata. Estas incluyen un cubo sólido y cubos con diferentes grados de porosidad. Los poros en estos cubos son de forma cilíndrica, cada uno relleno de agua además de que los cubos están rodeados por agua. Para la gráfica de absorción se muestra en primera instancia que las NP con menores poros (13 poros) tienen un comportamiento muy similar al cubo sólido, difiriendo principalmente en 650 nm de longitud de onda mostrando una absorción mayor. Para los cubos con 29 poros tienen un comportamiento muy similar, así como valores no muy alejados entre sí, de tal manera que se observa que sin importar la polarización el comportamiento no se ve afectado, estas NP muestran una mayor absorción al cubo sólido, presentando más bandas y un aumento considerable de la absorción. En las líneas espectrales de mayor cambio se observan que son las NP de 45 poros, las cuales difieren entre si cuando tienen una polarización de la onda incidente de forma paralela y perpendicular al poro, de tal forma que el cubo con 45 poros y polarización perpendicular muestra desde los 325 nm de longitud de onda un aumento del espectro de eficiencia óptica de la absorción, contando en su línea espectral con más bandas que la NP sólida, además de un máximo bastante prominente, por su parte la NP con 45 poros y polarización paralela sigue el mismo comportamiento que su contraparte pero con una menor absorción y menos bandas en su líneas espectral. Para el espectro de eficiencia óptica de la dispersión se tiene un comportamiento en que las NPs con 13 poros y la NP con 29 poros y polarización paralela muestran valores muy similares al cubo sólido. Comparando la NP con 29 poros y polarización perpendicular con la NP de 45 poros y polarización paralela muestran valores muy similares entre si, de tal manera que tienen una dispersión ligeramente menor a la mostrada en el cubo sólido, además de mostrar un máximo con menor amplitud. Finalmente el cubo con 45 poros y polarización perpendicular muestra la menor dispersión además de máximos de menor amplitud y con varias bandas que muestran una menor dispersión, las demás líneas espectrales no muestran esta clase bandas por lo que esto es debido al número de poros y el tipo de polarización en la onda incidente. En la eficiencia óptica de extinción muestra un comportamiento muy particular ya que se denota un comportamiento

y valores muy similares entre las líneas espectrales, solo difiriendo notablemente el cubo con 45 poros y polarización perpendicular entre las longitudes de onda de 600 y 650 nm donde se muestra un máximo menor a las demás NPs, por otra parte se nota un ligero aumento en el espectro de eficiencia óptica de la extinción en longitudes de onda mayores a 675 nm en los cubos con 29 y 45 poros con polarización paralela al poro.

Comparando a cada una de estas gráficas con las respectivas gráficas de las figuras 6.20a y 6.20b se nota un corrimiento en las gráficas de la eficiencia óptica de absorción de la figura 6.18, el corrimiento es de alrededor de 120 nm, el cambio de medio de aire a agua provoca dicho corrimiento a la derecha. A pesar de esto en estos casos es de destacar que nuevamente se observa que la luz dispersada es mayor que la absorbida en todos los casos. El máximo de la banda del espectro de eficiencia óptica de extinción se debe principalmente además de la luz dispersada, al máximo de la banda del espectro de eficiencia óptica de absorción. La banda observada en el espectro de eficiencia óptica de la absorción, alrededor de 500 nm para NPs inmersas en aire y 620 nm para NPs inmersas en agua muestra el corrimiento de la línea espectral. No se observa la generación de otro plasmón de superficie más allá del posible que se genera en el máximo de la banda del espectro de eficiencia óptica de absorción para NPs con poros rellenos de agua y medio el agua.

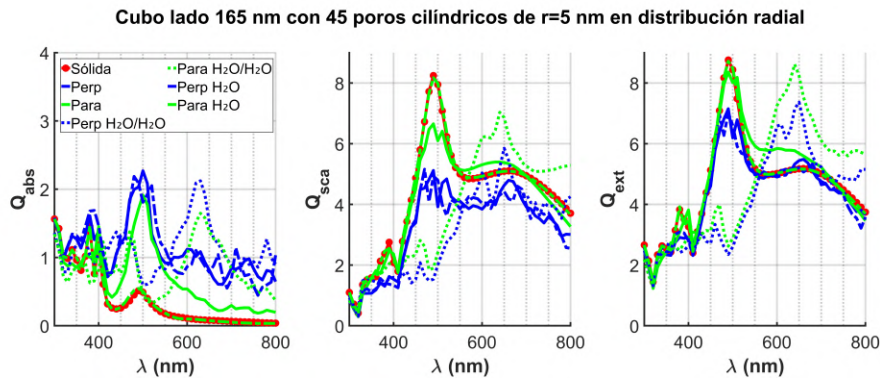


Figura 6.22: Cubos de plata de lado 165 nm y poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm. El cubo tiene 45 poros y esta inmerso en diferentes medios así como diferentes rellenos de poro. La etiqueta perp (para) indica que el campo incidente tiene polarización perpendicular (paralela) a los poros. Los cubos con (sin) etiqueta adicional H_2O representa a los cubos con los poros rellenos de agua (aire) y medio el aire, con la etiqueta H_2O/H_2O son los cubos con agua como medio y relleno de poro.

En la figura 6.22, se presentan las eficiencias ópticas Q_{abs} , Q_{sca} y Q_{ext} con mayor cambio presentado, esto es para cubos de plata con 45 poros, y como punto de comparación un cubo sólido. En el espectro de eficiencia óptica de la absorción se muestra inicialmente un comportamiento y valores similares entre las líneas espectrales de las NPs con medio el aire en longitudes de onda menores a 400 nm, donde seguidamente las NPs con medio el aire y polarización perpendicular siguen valores similares entre sí, siendo ligeramente menor la absorción en las NPs con poros rellenos de agua pero con mayor cantidad de bandas, ambos comparado con el cubo sólido muestran una mayor absorción. Por su parte las NPs con medio el aire y polarización paralela muestran una mayor absorción al cubo sólido pero menor en comparación a los cubos con polarización perpendicular, estos cubos no presentan un crecimiento de el espectro de eficiencia óptica de la absorción como su contraparte, en especial el cubo con 45 poros con medio el aire que tiene valores muy similares a los presentados en la línea espectral del cubo sólido. Con los cubos con su medio el agua se muestra que sus líneas espectrales muestran un corrimiento de aproximadamente de 75 nm, siendo esto provocado por el medio circundante. En el caso de la dispersión se muestran que las líneas espectrales de las NPs tienen un comportamiento estable, ligeramente diferentes pero con valores similares entre si. Las NPs con polarización perpendicular muestran valores y

comportamientos muy similares entre si, siendo que tienen una dispersión menor. Por su lado las NPs porosas con polarización paralela muestran una mayor dispersión a la sólida en el intervalo de longitudes de onda de 600 nm a 700 nm, siendo que en las demás longitudes de onda tienen un comportamiento similar a la sólida. Solo los cubos con poros relleno de agua y medio el agua muestran valores diferentes a sus homólogos siendo que tiene una menor dispersión en sus longitudes de onda, así como un corrimiento. Entonces se muestra que sin importar el relleno del poro será igual siendo diferente solo por el número de poros y la polarización de la onda incidente con la NP, aunque el medio también influye solo genera un desplazamiento de la línea espectral. Para la eficiencia óptica de extinción se observa que las NPs con el medio el aire y polarización paralela tienen valores muy similares al cubo sólido. Las NPs con el medio aire y polarización perpendicular al igual que sus contrapartes tienen valores muy similares difiriendo solo en algunos puntos, su extinción en comparación de la sólida es menor y muestran además la menor extinción en su punto máximo, siendo que solo son similares en comportamiento. Por su parte los cubos con poros rellenos de agua y medio el agua al igual que la eficiencia óptica de absorción tiene un corrimiento de su línea espectral, además de mostrar valores similares de la extinción, siendo que el máximo de la NP con polarización paralela muestra un máximo de igual magnitud al cubo sólido.

En los cubos de plata, se observan líneas espectrales con demasiadas bandas muy variados que indican la presencia de múltiples plasmones, lo cual se debe al material, morfología y tamaño de la partícula. Analizando las distintas polarizaciones de la onda incidente, las eficiencias ópticas varían, mostrando un ligero aumento en la absorción con la polarización perpendicular al poro pero no teniendo un cambio significativo ante esta situación. Para la baja porosidad, las propiedades ópticas son similares a las de la NP sólida. A partir de los cubos con 29 poros, hay una tendencia al aumento de el espectro de eficiencia óptica de la absorción y una disminución en el espectro de eficiencia óptica de la dispersión y extinción. Los cubos con 45 poros cilíndricos, aunque más porosas, presentan diferencias pequeñas respecto a la NP sólida en el espectro de eficiencia óptica de la extinción y dispersión, mientras que el espectro de eficiencia óptica de la absorción si se tiene un aumento significativo generando de igual forma más excitaciones y por ende más plasmones.

Comparando las NPs con poros rellenos de aire y de agua, ambas en un medio de aire, muestran un comportamiento similar pero con algunas diferencias, siendo que al parecer se tienen más bandas con los poros rellenos de agua. Aunque hay cambios, estos no son muy significativos, sugiriendo que el relleno de los poros no altera las propiedades pero si puede generar más plasmones. Las NPs con poros rellenos de agua con medio el agua presentan un desplazamiento hacia la derecha de su línea espectral, similar al caso del oro. Este desplazamiento, atribuido al medio, no es muy pronunciado, y si se compararan las líneas espectrales de las NPs en aire, se obtendrían resultados muy similares entre si.

6.3. Presión por radiación

Para la presión por radiación se modelaron NPs con diferente grado de porosidad y diferente tamaño, de tal manera que se obtuvo la presión por radiación para ciertas longitudes de onda. La presión por radiación obtenida se vario de igual manera con diferentes casos de material de los poros, el medio y el material de la NP.

Lo obtenido en la presión por radiación es la fuerza resultante en dirección \hat{x} (debido a la fuerza de las demás componentes es prácticamente 0 y esta es la dirección de propagación de la onda incidente) ante diferentes longitudes de onda, en los resultados esta fuerza al ser muy pequeña sus unidades se denotan como $N \times 10^{-18}$ que con prefijos serían atto-Newtons (aN), la fuerza mencionada se observa en la sección 4.3. Los resultados presentados tendrán variaciones dependiendo de si la magnitud de la fuerza $F_{\text{rad}} < 0$ o $F_{\text{rad}} > 0$. Al tomar la fuerza en la dirección \hat{x} y al estar las partículas inmersas en agua o en aire, no hay una forma exacta de determinar qué sucede con la NP. Esto es, si está siendo atraída, levitada, empujada o arrastrada. En este caso, se interpretan las fuerzas $F_{\text{rad}} < 0$ como si la NP estuviera siendo arrastrada o atraída en dirección contraria a la onda incidente (\hat{x}), mientras que para $F_{\text{rad}} > 0$, la NP estaría siendo empujada en la dirección de la onda incidente (\hat{x}).

6.3.1. NPs esféricas con porosidad cilíndrica y esférica

NPs de oro

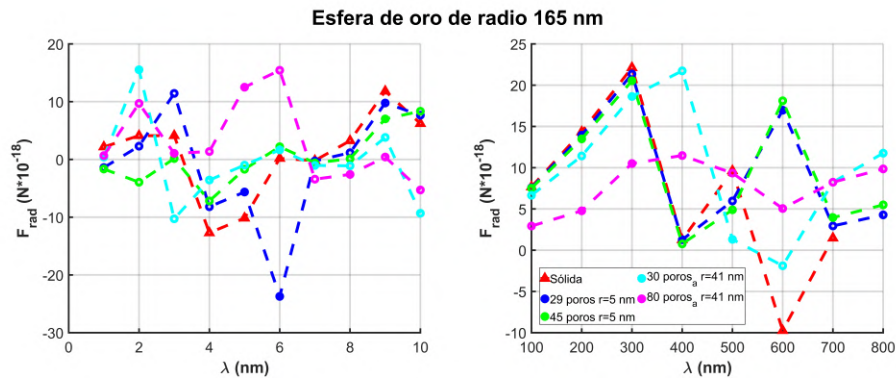


Figura 6.23: Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

En la figura 6.23 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda. A la izquierda, se muestra el rango de 1 a 10 nm, mientras que a la derecha se muestra el rango de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda, se observa que la F_{rad} obtenida en cada esfera no sigue un patrón específico según el número o tamaño de los poros. Cada esfera muestra un patrón único, con aumentos y disminuciones en la fuerza en diferentes longitudes de onda. Es interesante destacar la presencia de fuerzas positivas y negativas, que podrían interpretarse como comportamientos de empuje y arrastre, respectivamente. Las fuerzas se encuentran en un rango aproximado de $-25 N \times 10^{-18}$ hasta $15 N \times 10^{-18}$.

En la gráfica de la derecha, que abarca longitudes de onda mayores, se observa un comportamiento ligeramente más estable en comparación con la gráfica de la izquierda. Algunas esferas

muestran patrones similares entre los 100 nm y los 400 nm, como la esfera sólida y las esferas con 29 y 45 poros cilíndricos. Sin embargo, las esferas con 30 y 80 poros esféricos distribuidos de forma aleatoria muestran patrones únicos. Se destaca que en esta gráfica, la esfera sólida y la esfera con 30 poros esféricos distribuidos aleatoriamente muestran $F_{\text{rad}} < 0$, mientras que las demás esferas muestran $F_{\text{rad}} > 0$. Las fuerzas se encuentran en un rango aproximado de $-10 N \times 10^{-18}$ hasta $25 N \times 10^{-18}$. En la figura 6.24 se presentan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes

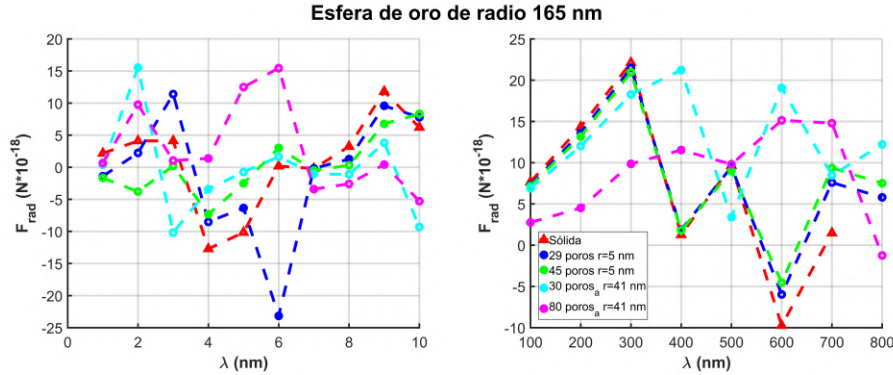


Figura 6.24: Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como poros_a son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

rangos de longitud de onda. A la izquierda, se muestra el rango de 1 a 10 nm, mientras que a la derecha se muestra el rango de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda, se observa un comportamiento muy similar al mostrado en su homólogo en la figura 6.23 con polarización perpendicular al poro. Esto sugiere que en este caso la polarización de la onda incidente no afecta a F_{rad} en las longitudes de onda de 1 a 10 nm. No se observan cambios significativos entre la polarización perpendicular y paralela, lo que indica que tienen el mismo comportamiento.

En cuanto a las longitudes de onda mayores, entre 100 y 800 nm, se observan diferencias ligeras entre la gráfica de la figura 6.23 y 6.24, especialmente después de los 400 nm. Mientras que en longitudes de onda menores muestran un comportamiento similar, ahora las esferas con 29 y 45 poros de forma cilíndrica tienen un comportamiento más similar a la esfera sólida. Por su parte, las esferas con poros esféricos distribuidos aleatoriamente muestran su propio comportamiento. En esta ocasión, la esfera con 30 poros presenta $F_{\text{rad}} < 0$ y la esfera con 80 poros muestra un comportamiento más pronunciado. Estos resultados sugieren una mayor estabilidad en la polarización paralela a los poros.

En la figura 6.25 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda: a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda, a pesar de que los poros están rellenos de agua, no se observa una semejanza significativa entre las NPs porosas y la NP sólida. Tampoco se nota una relación clara entre el número de poros y el tamaño de los mismos. Cada esfera tiene un comportamiento único, y el material del poro influye en las líneas espectrales obtenidas. Por lo tanto, en el rango de 1 a 10 nm, el comportamiento de cada NP simulada es característico, con valores de F_{rad} que pueden ser tanto positivos como negativos.

En la gráfica de la derecha, que abarca longitudes de onda de 100 a 800 nm, se observa un comportamiento más congruente entre algunas esferas. Las esferas con 29 y 45 poros siguen patrones similares entre sí y son comparables a la esfera sólida antes de los 500 nm de longitud de onda. Sin

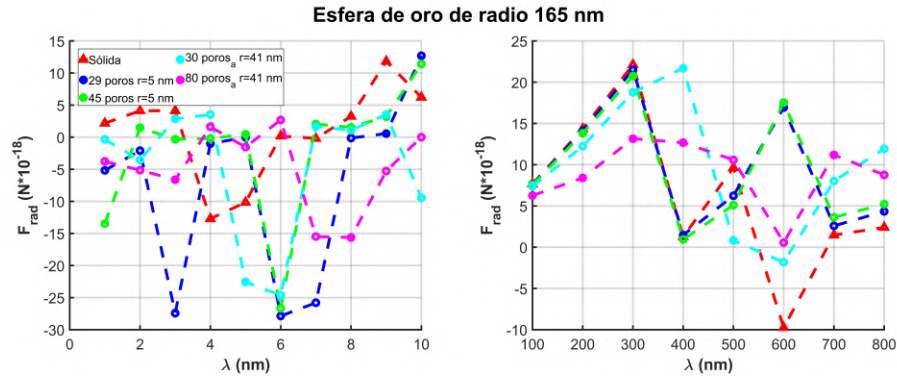


Figura 6.25: Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

embargo, las esferas con poros distribuidos aleatoriamente muestran comportamientos propios, sin seguir un patrón estable en comparación con las demás NP. Es importante destacar que entre esta gráfica y las de las figuras 6.23 y 6.24, los valores son muy similares en el rango de 100 a 500 nm. A longitudes de onda mayores, los valores difieren sin seguir un patrón específico.

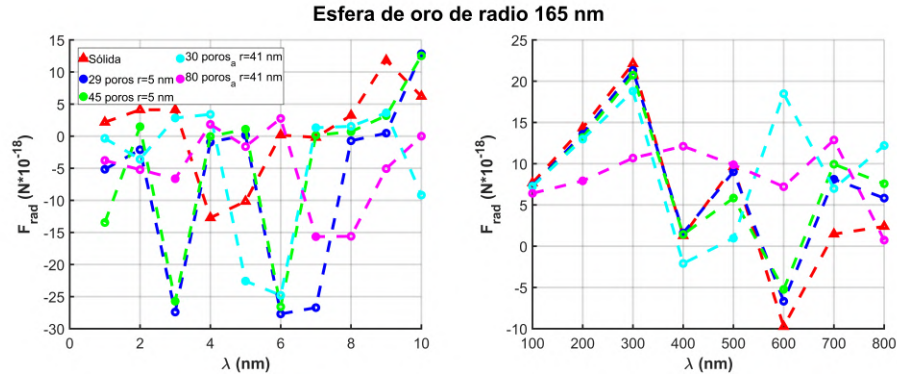


Figura 6.26: Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

En la figura 6.26 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda, a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda, al comparar con la gráfica de la izquierda de la figura 6.25, se obtienen valores muy similares, indicando que no hay una diferencia significativa entre la polarización paralela y perpendicular de la onda incidente en las NP. Esta gráfica sigue el mismo patrón que la de la figura 6.25. Además, las NP con 29 y 45 poros, así como la NP sólida, siguen un patrón similar con valores comparables a los de la figura 6.23.

Para la gráfica de la derecha, al compararla con la gráfica de la derecha de la figura 6.25, se observa una similitud en las líneas espectrales de las NP en longitudes de onda menores a 400 nm.

Sin embargo, después de esta longitud, los patrones difieren. Comparando con la gráfica similar en la figura 6.24, se encuentra un patrón entre las NP sólida, de 29 poros y de 45 poros, diferenciándose solo las NP de 30 y 80 poros esféricos con distribución aleatoria.

Por lo tanto, se infiere que no hay una diferencia notable en F_{rad} cuando el material de los poros cambia, ya que los comportamientos observados son muy similares entre las diferentes configuraciones de poros en términos de su efecto sobre F_{rad} .

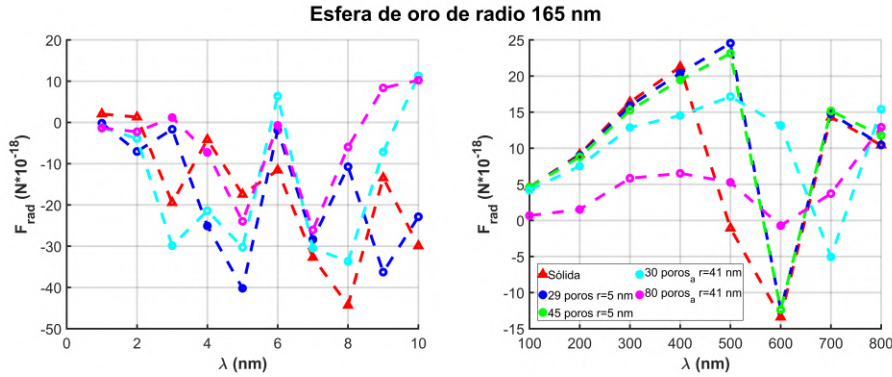


Figura 6.27: Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como *poros_a* son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el agua y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

En la figura 6.25 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda, a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda, con longitudes de onda de 1 a 10 nm, se observan comportamientos únicos para cada NP, con la excepción de la esfera con 45 poros, para la cual no se pudo obtener un cálculo. Analizando las demás NP, no se detecta un patrón común. Comparando con las gráficas de las figuras 6.23 y 6.25, no se encuentra un comportamiento similar. Destaca que, en comparación con estas gráficas, la F_{rad} positiva es menos frecuente, mientras que la F_{rad} negativa aumenta notablemente en magnitud, encontrándose mayormente en valores negativos. Esto indica que, en este rango de longitudes de onda y con los poros llenos de agua así como su medio el agua, las NP tienden a ser "arrastradas" por una fuerza negativa predominante.

Para la gráfica de la derecha, con longitudes de onda de 100 a 800 nm, se observa un patrón regular entre la NP sólida y las NP con 29 y 45 poros. Estas últimas dos muestran valores muy similares, diferenciándose de la NP sólida entre 400 nm y 600 nm, para luego volver a comportarse de manera similar. Las esferas con 30 y 80 poros esféricos distribuidos aleatoriamente presentan comportamientos únicos, como se ha observado anteriormente. Es destacable que la esfera con 80 poros no muestra un cambio notable en F_{rad} a lo largo de las diferentes longitudes de onda. Comparando esta gráfica con las correspondientes de las figuras 6.23 y 6.25, se nota que en este caso se alcanzan máximos y mínimos mayores en F_{rad} , además de un desplazamiento en la longitud de onda de los máximos, que ahora se encuentran alrededor de los 500 nm, en lugar de los 300 nm observados anteriormente.

En resumen, las NP con poros llenos de agua y con el medio el agua muestran comportamientos únicos en el rango de 1 a 10 nm, con una tendencia hacia fuerzas radiales negativas. En el rango de 100 a 800 nm, las NP con 29 y 45 poros siguen patrones similares a la NP sólida, mientras que las NP con poros esféricos distribuidos aleatoriamente presentan comportamientos únicos y mayores variaciones en F_{rad} .

En la figura 6.26 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de

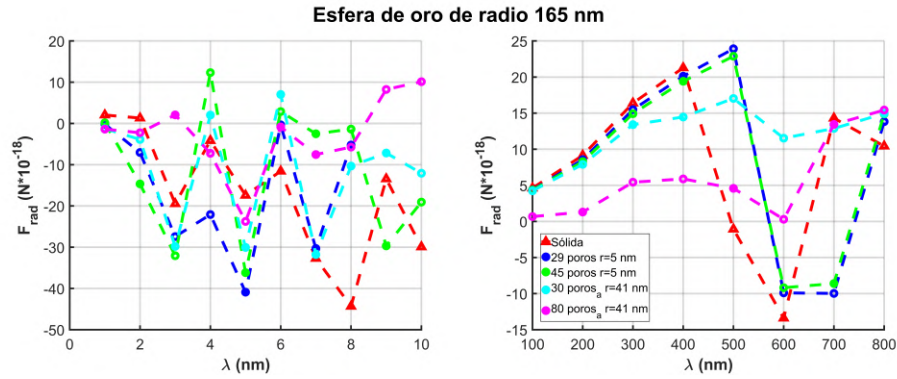


Figura 6.28: Esferas de oro con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como *poros_a* son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el agua y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda, para las longitudes de onda de 1 a 10 nm, se denota un comportamiento particular para cada NP. No se sigue un patrón específico entre ellas, y tanto las esferas con poros cilíndricos como las esferas con poros esféricos con distribución aleatoria muestran comportamientos únicos sin tendencia común. Comparando esta gráfica con la de la izquierda de la figura 6.28, se observa que presentan comportamientos distintos, aunque predomina el valor de F_{rad} menor a 0. Sin embargo, sus patrones son diferentes, siendo solo similares las esferas sólidas. Esto indica que en este caso sí influye la polarización de la onda incidente en cada NP.

Para la gráfica de la derecha, se tiene nuevamente un comportamiento muy similar entre las NP de 29 y 45 poros, al igual que la sólida, que solo difiere después de los 400 nm de longitud de onda, tendiendo a disminuir F_{rad} en comparación con estas. La esfera de 30 poros sigue un patrón similar a las NP de 29 y 45 poros hasta los 300 nm de longitud de onda, donde su comportamiento diverge pronunciadamente a mayores longitudes de onda. La NP con 80 poros muestra una magnitud pequeña de F_{rad} . Comparando esta gráfica con su homóloga en la figura 6.27, se denota el mismo comportamiento y valores muy similares entre cada NP, especialmente las NP con poros esféricos distribuidos aleatoriamente, hasta la longitud de onda de 600 nm. Después de esta longitud, cada NP tiene su propio comportamiento. Por lo tanto, entre 100 nm y 600 nm, la polarización de la luz incidente no parece afectar significativamente.

NPs de plata

En la figura 6.29 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda, se denota que cada NP tiene su propio comportamiento ante distintas longitudes de onda. Las NPs porosas no siguen un patrón claro en relación con el número o la forma de los poros, lo que indica que no se puede generalizar un comportamiento específico para todas las NPs. Es notable que todas las NPs presentadas en esta gráfica muestran tanto valores positivos como negativos de F_{rad} , lo que implica que experimentan fuerzas de arrastre y empuje en diferentes condiciones.

En la gráfica de la derecha, el comportamiento de las NPs es más estable y predecible. Por ejemplo, la NP sólida y la NP con 29 poros tienen valores muy similares y muestran la misma tendencia general. La NP con 45 poros, aunque similar a las anteriores entre los 100 y 300 nm, toma valores únicos a mayores longitudes de onda. Las NPs con poros esféricos distribuidos alea-

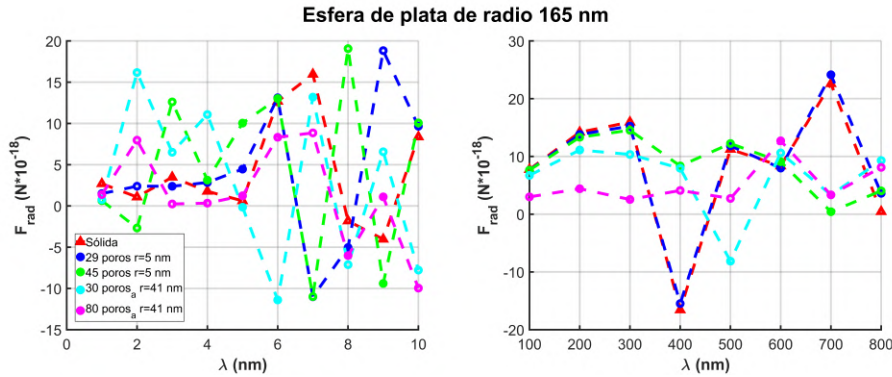


Figura 6.29: Esferas de plata con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire así como el relleno de los poros, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

toriamente siguen su propia tendencia distinta. La esfera de 30 poros, aunque sigue una tendencia propia, muestra valores cercanos a los de la esfera con 45 poros en ciertas longitudes de onda. Es destacable que las esferas con poros esféricos no presentan valores de F_{rad} menores a 0, lo que sugiere una ausencia de fuerzas de arrastre negativas en estas configuraciones.

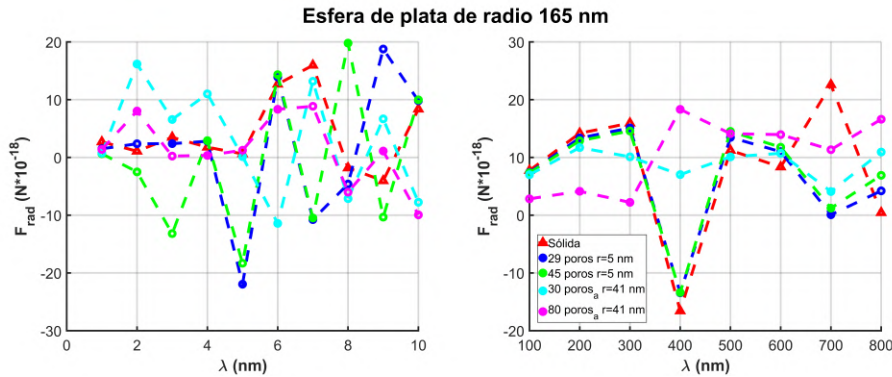


Figura 6.30: Esferas de plata con radio 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para esferas con 29 y 45 poros. Las esferas con 30 y 80 poros denotados como $poros_a$ son poros de forma esférica de $r = 41$ nm distribuidos aleatoriamente. El medio de la esfera es el aire así como el relleno de los poros, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

En la figura 6.30 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda en comparación con la gráfica de la izquierda de la figura 6.29, se observa que la NP sólida y las NPs con poros esféricos distribuidos aleatoriamente presentan valores muy similares entre sí, mostrando tendencias similares. La esfera con 29 poros tiene valores que siguen una tendencia similar, excepto a los 5 nm donde su valor se vuelve negativo, alcanzando el mínimo de todas las NPs analizadas.

La NP con 45 poros muestra un comportamiento más único; aunque en algunas longitudes de onda presenta valores similares a los de la NP con 29 poros, su comportamiento no sigue un patrón

consistente entre la polarización paralela y perpendicular de la onda incidente. Esto destaca la individualidad en el comportamiento de F_{rad} de esta NP con respecto a las demás.

Para la gráfica de la derecha al comparar esta gráfica con la correspondiente en la figura 6.29, se denotan valores muy similares para longitudes de onda menores a 400 nm. Para longitudes de onda mayores, los valores comienzan a diferir, excepto en el caso de la NP sólida, que mantiene una tendencia más estable.

Las esferas de 29 y 45 poros ahora presentan valores muy similares entre sí, lo que indica una mayor coherencia en su comportamiento a longitudes de onda mayores. La esfera con 30 poros esféricos distribuidos aleatoriamente también muestra valores cercanos a los de las esferas de 29 y 45 poros en algunos puntos. Por su parte, la esfera con 80 poros presenta un cambio significativo en comparación con su contraparte, mostrando una mayor variabilidad en sus valores de F_{rad} .

Es notable que, nuevamente, las esferas con poros esféricos no presentan valores de F_{rad} menores a 0, sugiriendo que no experimentan fuerzas de arrastre negativas en este rango de longitudes de onda.

6.3.2. NPs cúbicas con porosidad cilíndrica

NPs de oro

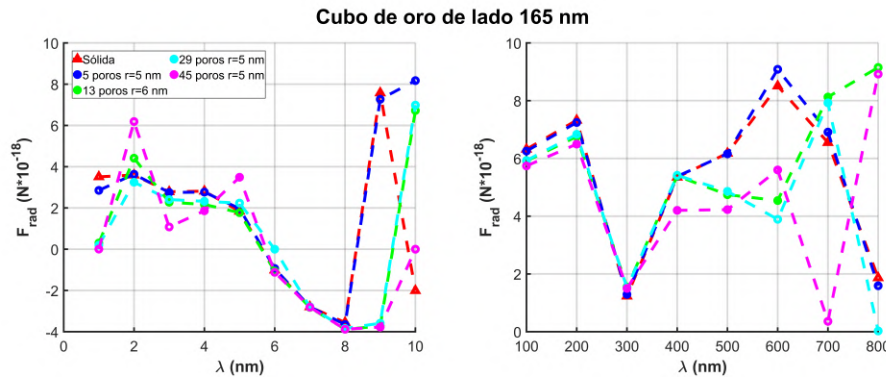


Figura 6.31: Cubos de oro de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 5, 29 y 45 poros. El cubo con 13 poros, sus poros tienen forma cilíndrica de $r = 6$ nm. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

En la figura 6.31 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm para cubos de oro de lado 165 nm con polarización de la onda incidente perpendicular a los poros.

En la gráfica de la izquierda se observa que, comparado con el cubo sólido, la NP con 5 poros tiene un comportamiento muy similar, diferenciándose solo en la longitud de onda de 10 nm. Esto puede interpretarse como una consecuencia de los pocos poros en la NP. Por otra parte, se nota que el cubo con 13 poros de $r \approx 16$ nm y el cubo con 29 poros de $r \approx 12$ nm tienen comportamientos muy similares entre sí, con diferencias muy pequeñas en ciertos puntos, y ambos difieren de la fuerza presentada en el cubo sólido. El cubo con 45 poros no muestra una similitud con los demás cubos en términos de valores, aunque presenta un comportamiento similar en los valores de la fuerza con el cubo de 29 poros. Un comportamiento generalizado que se observa es que, aunque puedan tener valores distintos, las NP presentan un patrón estable y similar entre sí.

En la gráfica de la derecha se observa que, entre los 100 nm y 400 nm de longitud de onda, las NPs se comportan de manera muy similar, diferenciándose solo en magnitud en ciertos puntos pero

siguiendo un patrón muy similar. En los puntos donde difieren, se observa que la fuerza disminuye a medida que aumenta la porosidad.

A longitudes de onda mayores a 400 nm, los cubos siguen un comportamiento específico. Al observar el comportamiento de la NP sólida, se nota que esta, al igual que la NP con 5 poros, muestra un comportamiento muy similar, con diferencias muy pequeñas en la fuerza. Por otra parte, el cubo con 13 poros de $r \approx 16$ nm y el cubo con 29 poros de $r \approx 12$ nm tienen comportamientos muy similares entre sí, diferenciándose solo en longitudes de onda mayores a 700 nm, siguiendo la misma tendencia que en la gráfica de la izquierda. El cubo con 45 poros tiene su propio comportamiento único, de tal forma que no sigue una tendencia.

Es destacable que ninguna de las NP mostró una fuerza menor a 0, es decir, siempre se observó un empuje en las NPs.

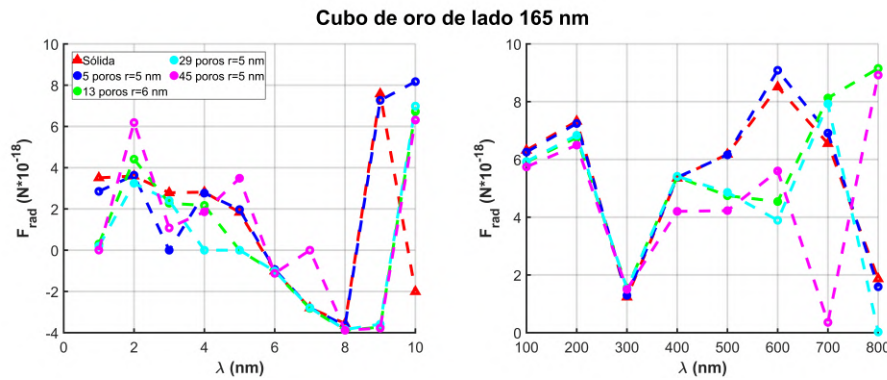


Figura 6.32: Cubos de oro de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 5, 29 y 45 poros. El cubo con 13 poros, sus poros tienen forma cilíndrica de $r = 6$ nm. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

En la figura 6.32 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm para cubos de oro de lado 165 nm con polarización de la onda incidente paralela a los poros.

Analizando la gráfica de la izquierda se observa que, al inicio, las fuerzas presentadas en las NPs no siguen una tendencia particular, mostrando cada una valores únicos de la fuerza. Para el cubo con 5 poros, se observa que tiene valores muy similares al cubo sólido, diferenciándose solo en algunos puntos, como en la longitud de onda de 3 nm, donde presenta una fuerza menor, o en los 10 nm, donde la fuerza es mayor. Por su parte, el cubo con 13 poros de $r \approx 16$ nm y el cubo con 29 poros de $r \approx 12$ nm muestran nuevamente valores muy similares entre sí, difiriendo solo en las longitudes de onda de 2 y 4 nm. La NP con 45 poros exhibe un comportamiento propio sin seguir un patrón específico; sin embargo, entre los 8 y 10 nm, muestra comportamientos y valores muy similares a los cubos con 13 y 29 poros.

En la gráfica de la derecha, para las longitudes de onda entre 100 y 800 nm, se denota un comportamiento estable, con correlaciones entre la fuerza obtenida en cada longitud de onda y las NP porosas. Se muestra que el cubo sólido y el cubo con 5 poros siguen exactamente el mismo comportamiento, con valores muy similares. Asimismo, se observa un comportamiento similar entre las NP de 13 y 29 poros, con resultados generalmente similares, excepto en su discrepancia en los 800 nm. Finalmente, el cubo con 45 poros muestra un comportamiento único, sin seguir un patrón o un comportamiento similar al de las demás NPs. En general, esta gráfica sigue el mismo comportamiento que la gráfica homóloga de la figura 6.31. En esta comparación, se observa que tienen resultados muy similares, lo que indica que no hay cambio debido a la dirección de la

polarización de la onda incidente.

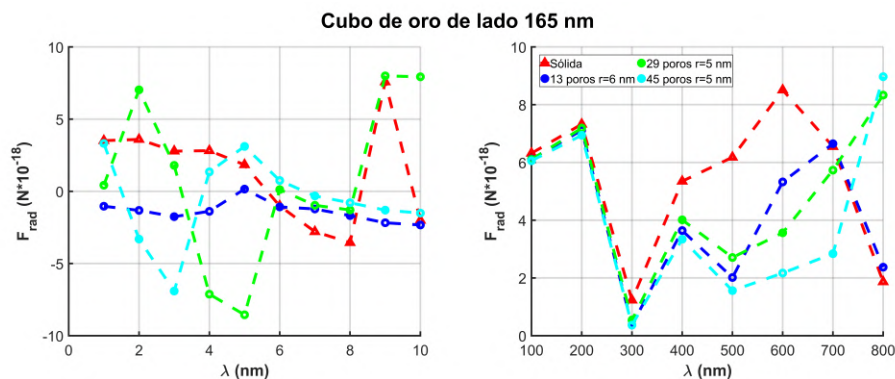


Figura 6.33: Cubos de oro de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 29 y 45 poros. El cubo con 13 poros, sus poros tienen forma cilíndrica de $r = 6$ nm. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

En la figura 6.33 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm para cubos de oro de lado 165 nm con polarización de la onda incidente perpendicular a los poros y poros rellenos de agua.

En la gráfica de la izquierda se observan los comportamientos particulares de cada NP. Mientras que con los cubos rellenos de aire se encontraba cierta relación entre las fuerzas de las NP, ahora no se observa un patrón claro entre ellas. La esfera sólida presenta su propio comportamiento, con fuerzas tanto negativas como positivas. Cada NP muestra su comportamiento distintivo. El cubo con 13 poros muestra una fuerza de magnitud muy pequeña, con la mayoría de sus valores en $F_{\text{rad}} < 0$, exceptuando en la longitud de onda de 5 nm, donde presenta una fuerza positiva muy pequeña. El cubo con 29 poros exhibe un comportamiento muy variado, mostrando los mayores valores de $F_{\text{rad}} > 0$ y los mayores valores de $F_{\text{rad}} < 0$, lo que indica un comportamiento de empuje y arrastre muy variable ante pequeños cambios en la longitud de onda incidente. La NP con 45 poros, en comparación con la de 29 poros, muestra un comportamiento más estable, con solo una $F_{\text{rad}} < 0$ significativa a 3 nm de longitud de onda.

Para la gráfica de la derecha, entre los 100 nm y 400 nm de longitud de onda, las NPs se comportan de manera muy similar, tanto el cubo sólido como porosos, diferenciándose solo en magnitud en ciertos puntos pero siguiendo un patrón general. En los puntos donde difieren, se observa que la fuerza disminuye a medida que aumenta la porosidad.

Entre los 400 nm y 500 nm de longitud de onda, se observan valores similares entre las NP porosas, siguiendo el mismo comportamiento que antes, pero con la NP sólida mostrando su propio comportamiento. A longitudes de onda mayores, cada cubo sigue su propio comportamiento sin mostrar una correlación clara. Una característica particular es que la fuerza aumenta a medida que la longitud de onda crece en los cubos con 29 y 45 poros, aunque cada uno presenta valores distintos. La NP con 13 poros, a partir de los 700 nm, tiene valores similares al cubo sólido.

Comparando las gráficas de la figura 6.31 y 6.33, se observa un cambio notable en las fuerzas cuando los poros están rellenos de agua. Con el agua, las NP muestran un comportamiento más irregular y una menor correlación entre ellas.

En la figura 6.34 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm para cubos de oro de lado 165 nm con polarización de la onda incidente paralela a los poros y poros rellenos de agua.

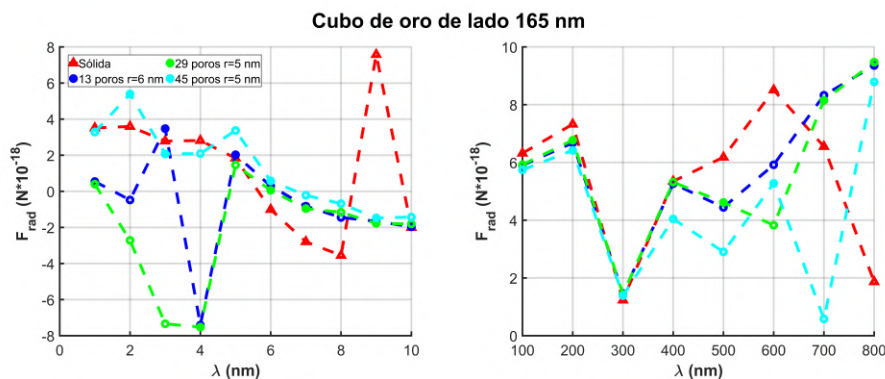


Figura 6.34: Cubos de oro de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5 \text{ nm}$ para cubos con 29 y 45 poros. El cubo con 13 poros, sus poros tienen forma cilíndrica de $r = 6 \text{ nm}$. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de agua, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

En la gráfica de la izquierda, se observa los comportamientos particulares de cada NP siendo que muestran una diferencia notable entre ellas, además de comparar dicha gráfica con la gráfica correspondiente de la figura 6.33. Cada una muestra valores únicos de fuerza. La NP sólida presenta su propio comportamiento con fuerzas tanto negativas como positivas. El cubo con 13 poros muestra una fuerza de magnitud variada, presentando en su mayoría valores de $F_{\text{rad}} > 0$, comparada con su contraparte esta NP muestra más actividad ante distintas longitudes de onda. Las NP de 29 y 45 poros entre 1 y 5 nm de longitud de onda presentan un comportamiento único en cada una de ellas sin tener una tendencia que muestre una correlación en los resultados. A partir de los 5 nm de longitud de onda y en longitudes de onda más largas se nota un comportamiento más estable y con valores muy similares entre las NP porosas, siendo que a pesar de no encontrar una relación estas muestran valores y un comportamiento muy similar entre sí. Esta gráfica comparada con la de la figura 6.33 muestra una tendencia distinta de tal forma que se denota la influencia de la polarización de la onda incidente.

En la gráfica de la derecha, entre los 100 nm y 400 nm de longitud de onda, las NPs se comportan de manera muy similar, tanto el cubo sólido como porosos, diferenciándose solo en una pequeña magnitud de la fuerza en ciertos puntos pero siguiendo un patrón general. En los puntos donde difieren, se observa que la fuerza disminuye a medida que aumenta la porosidad.

Para longitudes de onda más grande denotemos que el comportamiento de los cubos. Las NP con 13 y 29 poros siguen un comportamiento muy similar entre sí, solo difiriendo notablemente en la longitud de onda de 600 nm, por otra parte tanto la NP sólida como la de 45 poros tienen su propio comportamiento de tal manera que tienen su propia tendencia. Comparando esta gráfica con la gráfica correspondiente de la figura 6.33 se observa que cada una tiene un comportamiento diferente de tal forma que la polarización tiene efecto en la magnitud de la F_{rad} . Es de destacar también que en este caso la fuerza siempre fue positiva por lo que solo se notan efectos de empuje.

NPs de plata

En la figura 6.35 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm para cubos de plata de lado 165 nm con polarización de la onda incidente perpendicular a los poros.

En la gráfica de la izquierda se observa el comportamiento de las NPs de forma que tienden a tener su propio patrón y, si bien hay longitudes de onda donde convergen, este comportamiento no es muy usual. Analizando se observa que entre 1 y 7 nm de longitud de onda, el cubo sólido y el

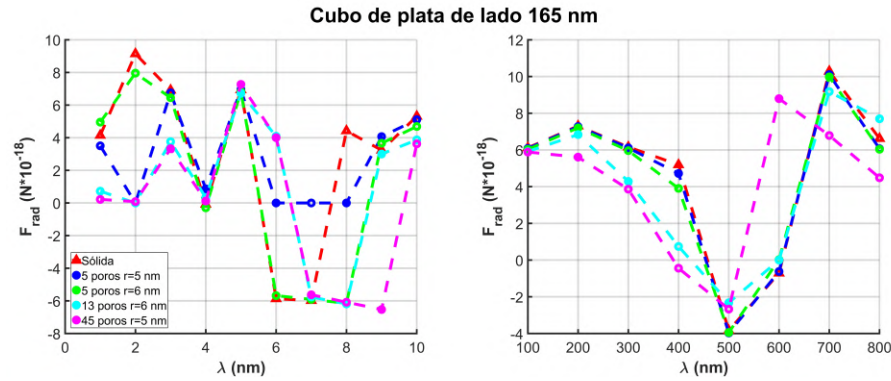


Figura 6.35: Cubos de plata de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 5 y 45 poros. Los poros de forma cilíndrica de $r = 6$ nm son para los cubos con 5 y 13 poros. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es perpendicular al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

cubo con 5 poros de $r = 6$ siguen el mismo comportamiento de tal manera que generan la misma fuerza en las mismas longitudes de onda. Sin embargo, a pesar de que el cubo con 5 poros $r = 5$ sea muy similar al cubo sólido, tiene valores muy distintos. En esta misma longitud de onda, las NPs con 13 y 45 poros se comportan prácticamente igual, difiriendo solo en una magnitud muy pequeña. De 7 nm en adelante, no se nota una tendencia o algún comportamiento estable, siendo que cada una sigue su propio comportamiento.

Para la gráfica de la derecha, en primera instancia se nota un comportamiento más estable. Las NPs sólida, de 5 poros de $r = 5$ y de 5 poros de $r = 6$ muestran valores muy similares entre sí, indicando que al tener poco número de poros, estas NPs se comportan como la sólida en todo el espectro. Por otro lado, la NP con 13 poros muestra un comportamiento diferente a la sólida entre 100 y 600 nm de longitud de onda, sin seguir algún comportamiento específico, pero demostrando una fuerza menor a la sólida. Entre los 600 y 800 nm tiene valores similares a la NP sólida.

El cubo con 45 poros muestra un comportamiento propio sin seguir alguna tendencia, ya que sus valores son variados en la escala y de igual forma en distintas longitudes de onda su fuerza es menor o mayor a la sólida.

En este caso, los valores de la F_{rad} son variados, mostrando múltiples puntos con fuerzas de empuje ($F_{\text{rad}} > 0$) y arrastre ($F_{\text{rad}} < 0$) respectivamente.

En la figura 6.36 se observan dos gráficas que muestran F_{rad} obtenidas en diferentes rangos de longitud de onda a la izquierda de 1 a 10 nm y a la derecha de 100 a 800 nm para cubos de plata de lado 165 nm con polarización de la onda incidente paralela a los poros.

Para la gráfica de la izquierda se observa que se tienen ciertas relaciones entre las fuerzas de las NPs. En primer lugar, se denota que el cubo sólido tiene su propio comportamiento sin converger con alguna NP porosa, solo entre 4 y 5 nm de longitud de onda donde todas las NPs, tanto sólida como porosas, tienen resultados similares. Por su parte, los cubos con 13 poros y 29 poros muestran valores muy similares entre sí, de tal manera que sus fuerzas difieren solamente en 10 nm. Por lo que para las longitudes de onda menores a 10 nm, las fuerzas obtenidas son muy similares entre sí. Por su parte, la NP con 45 poros muestra un comportamiento propio y particular en cada cierta longitud de onda. Por ejemplo, entre 1 y 2 nm se observa que los resultados de su fuerza son muy pequeños, cercanos a 0. Luego, entre 3 y 8 nm, sigue un comportamiento con valores muy similares a los cubos con 13 y 29 poros, y entre 9 y 10 nm sigue un comportamiento propio.

Observando la gráfica homóloga de la figura 6.35, se tiene que para los cubos con el mismo número de poros, los valores de la fuerza que presentan son muy similares entre sí, indicando que

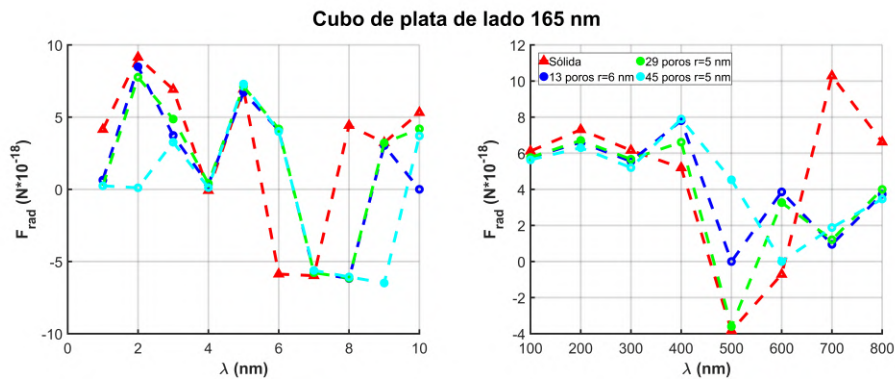


Figura 6.36: Cubos de plata de lado 165 nm con poros de forma cilíndrica de $r = 5$ nm para cubos con 29 y 45 poros. Los poros de forma cilíndrica de $r = 6$ nm son para el cubo con 13 poros. El medio del cubo es el aire y los poros están rellenos de aire, además de que la polarización es paralela al poro. La gráfica de la derecha es la F_{rad} en las λ de 1 a 10 nm y la gráfica de la izquierda en las λ de 100 a 800 nm.

no se observa un efecto significativo que altere las NPs cuando se tiene una polarización diferente.

En la gráfica de la derecha, en primera instancia se observa que las NPs, tanto sólida como porosas, entre 100 y 300 nm tienen valores muy similares, donde seguidamente cada cubo genera valores diferentes de la fuerza. La NP sólida genera valores muy diferentes a las demás NPs porosas, sin que alguna NP porosa presente valores cercanos a esta. Por su parte, los cubos con 13 y 29 poros tienen comportamientos similares entre sí, aunque difieren en algunas longitudes de onda, siendo la más notable en 500 nm donde se observa la mayor discrepancia. Sin embargo, para las demás longitudes de onda, tienen valores muy similares de la fuerza. Finalmente, la NP con 45 poros tiene sus propios valores de la fuerza, sin que se pueda encontrar alguna relación coherente con las demás, aunque en ciertas longitudes de onda muestra valores similares al cubo con 13 y 29 poros.

Comparando esta gráfica con la gráfica correspondiente de la figura 6.35, se observa que los valores de la fuerza para las NPs con el mismo número de poros son diferentes. Esto indica que la polarización de la onda afecta significativamente a la fuerza obtenida en cada cubo entre 100 y 800 nm de longitud de onda de la onda incidente.

6.4. Campo cercano

Los resultados del campo cercano se representaron gráficamente en tres dimensiones para visualizar la intensidad del campo de la figura, permitiendo una comparación detallada de cada punto en relación con el conjunto total. El campo analizado es el campo eléctrico, cuya intensidad se indica mediante un gradiente de color. En este, los tonos violetas corresponden a intensidades bajas, mientras que los tonos rojos indican intensidades más altas. La intensidad del campo eléctrico se denota por $|E|$, siendo estos los resultados de la intensidad.

El campo eléctrico cercano, como se menciona en las secciones 4.4 y 5.2, se genera a partir de una onda EM incidente. Para este estudio, se seleccionó una longitud de onda de 633 nm para la onda incidente, ya que corresponde a la longitud de onda de un láser rojo, el cual es muy utilizado en experimentos. De esta manera es que se presenta el campo cercano para NP esféricas y cúbicas porosas, de oro y plata, cada una en distintas condiciones. En cada NP porosa se marcan la posición de sus poros con figuras translúcidas blancas.

6.4.1. NPs esféricas con porosidad cilíndrica

Las esferas de esta sección tienen como características ser las esferas con mayor respuesta en sus eficiencias y de las cuales se tiene un mayor control para un mejor análisis. Estas son las esferas con 45 poros, además se obtuvo el campo de las esferas sólidas de cada material. Estas NP tienen un radio de 165 nm, cuando tienen poros, estos tienen un $r = 5$ nm y una separación de 33 nm de centro a centro, es decir tienen una separación de

NPs de oro

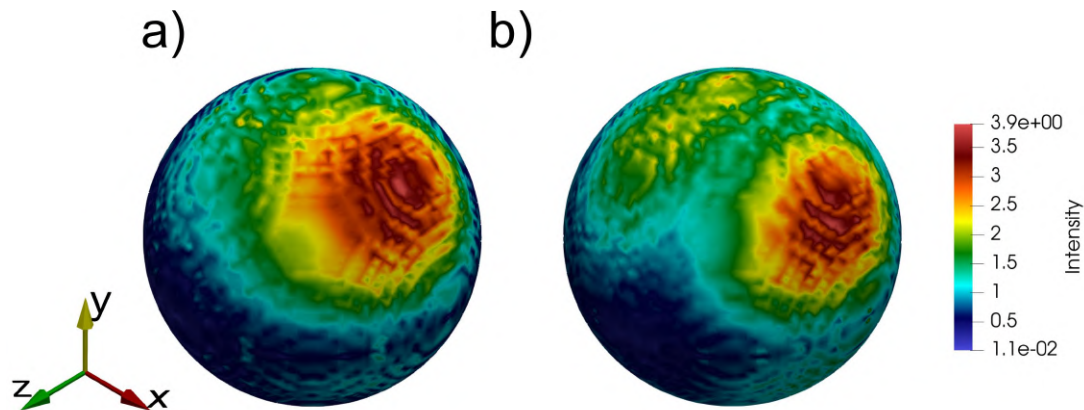


Figura 6.37: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de oro. a) Representa una esfera sólida con medio el aire y b) Representa una esfera sólida con medio el agua.

En las esferas sólidas de oro de la figura 6.37 se observa un campo eléctrico no uniforme de tal forma que se tienen regiones con puntos calientes (*hot spots* en inglés). En la esfera sólida que se encuentra en el aire (a)) se tiene un solo punto caliente de tal forma que su resonancia de plasmón de superficie puede deberse a una contribución dipolar.

Comparando ahora a la esfera sólida con su medio el agua (b)) se puede notar un punto caliente con ligera disminución de la intensidad pero mayormente distribuido en la NP, de tal forma que su resonancia es asociada a una contribución mayor a la dipolar.

Las esferas porosas mostradas en la figura 6.38 están posicionadas de tal forma que se puedan observar sus poros desde una vista superior, con anillos translúcidos blancos marcando la posición

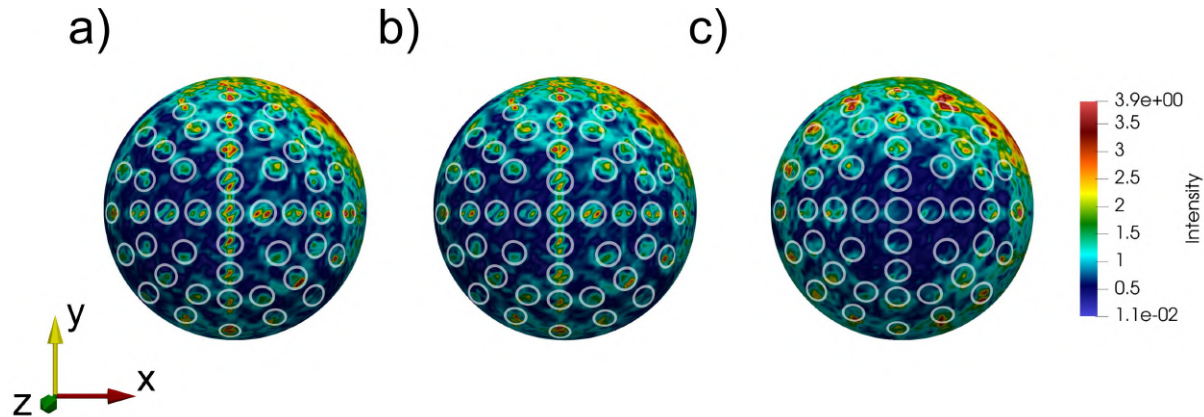


Figura 6.38: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de oro con 45 poros. Los anillos translúcidos blancos en ellas marcan la posición de los poros. a) Representa una esfera con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa una esfera con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa una esfera con medio el agua y poros rellenos de agua.

de los poros simulados. Además del punto caliente que se observa en la versión sólida, los poros presentan una intensidad notable en el campo eléctrico.

En la figura a), se tiene una NP de oro con medio circundante el aire con poros rellenos de aire. Se observa que todos los poros presentan una mayor intensidad en el campo eléctrico comparado con el material sólido de la superficie, excepto en el punto caliente. Además, esta intensidad es similar entre cada poro de tal forma que se nota cierta distribución uniforme.

En la figura b), se observa una NP de oro con medio el aire con poros rellenos de agua. En este caso, se presenta un comportamiento similar al de la figura a). Si se observa en detalle cada poro de la NP, la única diferencia notable es una ligera disminución en la intensidad del campo eléctrico $|E|$. Esta diferencia se debe al distinto material que rellena el poro, indicando que aunque los poros rellenos de agua afectan el campo eléctrico, esta diferencia no es significativa.

En la figura c), se tiene una NP de oro en un medio de agua con poros también rellenos de agua. Aquí, el punto caliente es diferente en comparación con la NP sólida, y la intensidad de $|E|$ se ve afectada en cada poro. En comparación con las figuras a) y b), la figura c) muestra una mayor intensidad de $|E|$ en los poros más externos al poro central. Existe una diferencia notable en la intensidad de $|E|$ entre cada poro en la NP mostrada, cambiando drásticamente lo observado en las figuras anteriores. En los casos a) y b), aunque hay diferencias en la intensidad de $|E|$ en los poros, no son tan marcadas como en la figura c).

Por lo tanto para las NPs de oro, el relleno del poro al ser agua no tiene un cambio en la intensidad de $|E|$, si no que se tiene un efecto significativo cuando el medio es diferente.

En la figura 6.39, se muestra la sección transversal de cada NP presentada en la figura 6.38, proporcionando una imagen de cómo se ven los poros en el interior de la esfera de oro porosa correspondiente, los poros están marcados con una franja translúcida de color blanco para ubicar la posición de cada uno.

En primer lugar, la figura a) muestra cómo está distribuido el campo en su parte exterior. A medida que se adentra en la NP, la intensidad de $|E|$ disminuye, pero se observa una ligera mayor intensidad de $|E|$ en los poros. Si se analiza con cuidado, por ejemplo, en el poro central, se puede ver una mayor intensidad del campo, indicando que $|E|$ interactúa con los poros permitiendo que el campo penetre. Aunque los poros permiten la penetración del campo, la intensidad de $|E|$ no es muy alta, pero se nota un aporte, especialmente en las zonas exteriores.

En la figura b), como se señaló en la figura 6.38, la intensidad tiene un comportamiento muy similar al de la figura a). Aunque la intensidad a simple vista es muy parecida, se nota una

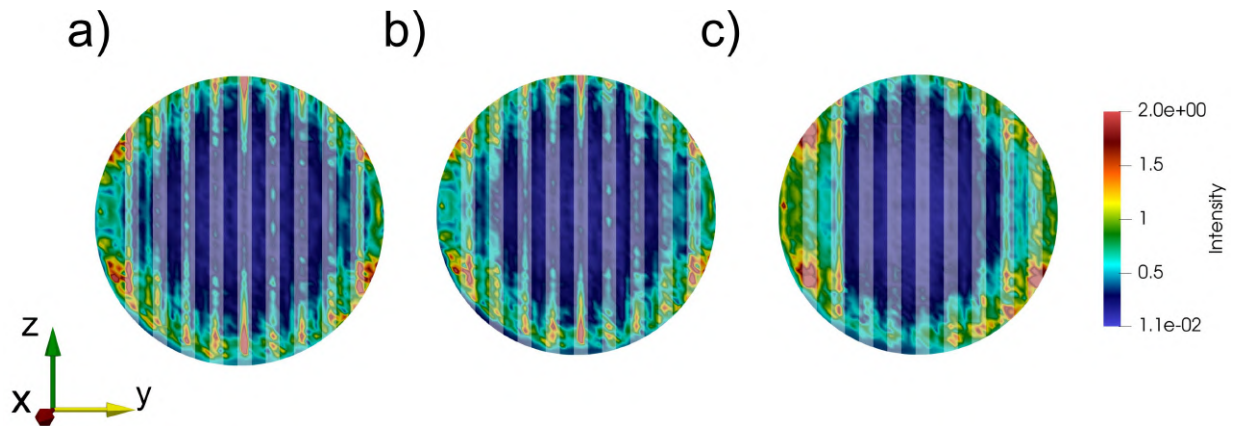


Figura 6.39: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de oro con 45 poros, se realizó un corte transversal en la NP de manera que se observa dentro de la esfera. Las franjas translúcidas blancas remarcan la posición de los poros. a) Representa la sección transversal de una esfera con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa la sección transversal de una esfera con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa la sección transversal de una esfera con medio el agua y poros rellenos de agua.

disminución de $|E|$ al observar detalladamente, indicando que aunque ambos comparten los mismos puntos de mayor intensidad, la magnitud es menor cuando los poros están rellenos de agua.

En la figura c), se observa una distinción clara respecto a las figuras a) y b). Primero, la intensidad en los poros centrales es mínima, aunque aumenta ligeramente su aportación no es muy grande. En cambio, en los poros más alejados del centro, hay una gran interacción con la NP, mostrando una alta intensidad del campo en su interior y un aumento de la intensidad en las zonas exteriores. Se observa en el poro más alejado de la izquierda una intensidad muy alta del campo, con una disminución en el medio y un aumento a medida que se acerca a la derecha. Este último comportamiento es debido al medio de la NP siendo que cambia la longitud de onda de la onda incidente.

De manera que para las NPs de oro mostradas en las figuras 6.37, 6.38 y 6.39 los poros sí afectan la intensidad del campo eléctrico en la NP. Con las NP porosas con relleno del poro agua no se tienen un cambio significativo en la intensidad de $|E|$ en comparación de los poros rellenos de aire, sino que se tiene un efecto significativo cuando el medio es diferente. Por lo que se tiene que las esferas con poros ayudan a la penetración del campo eléctrico, siendo entonces que hay aumento del campo dentro, en comparación de las esferas sólidas.

NPs de plata

En las esferas sólidas de plata de la figura 6.40 se observa un campo eléctrico no uniforme de tal forma que se tienen regiones con puntos calientes por la onda incidente. En la esfera sólida que se encuentra en el aire (a)) se tiene un solo punto caliente de tal forma que su resonancia de plasmón de superficie puede deberse a una contribución dipolar, la NP en ese ángulo puede observarse notablemente la diferencia de los puntos donde el campo eléctrico tiene mayor intensidad.

Comparando ahora a la esfera sólida con su medio el agua (b)) se puede notar un punto caliente con ligera disminución de la intensidad pero mayormente distribuido en la NP, además de mostrar una mayor contribución del campo eléctrico en toda la NP, de tal forma que su resonancia es asociada a una contribución mayor a la dipolar, además se muestra el punto caliente en una posición diferente de la NP.

En la figura 6.41 se muestran las NP de plata en una vista superior, de tal forma que se puedan observar los poros en ellas. Los poros están marcados con anillos translúcidos blancos para indicar

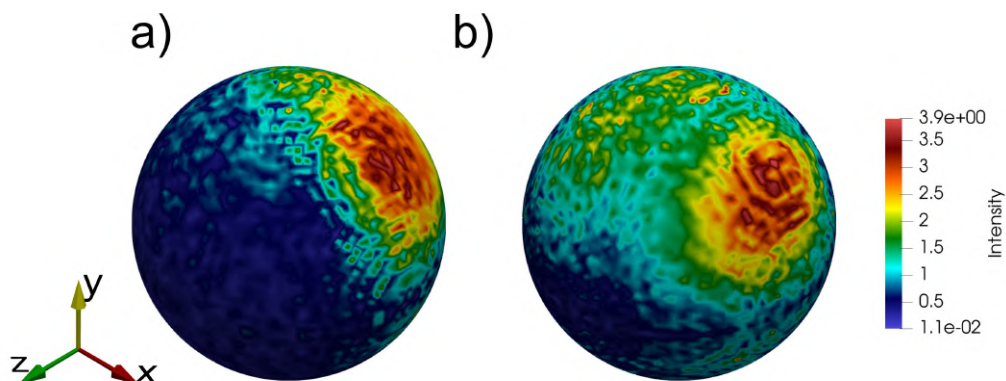


Figura 6.40: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de plata. a) Representa una esfera sólida con medio el aire y b) Representa una esfera sólida con medio el agua.

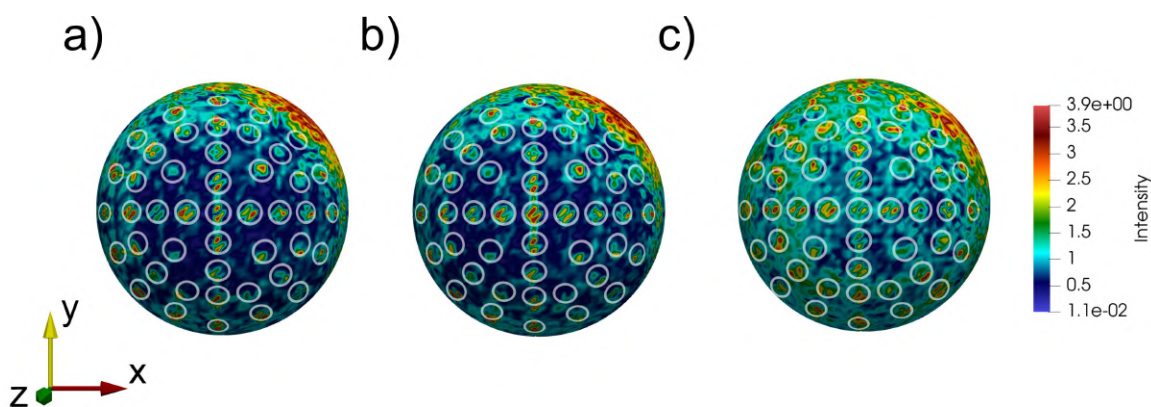


Figura 6.41: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de plata con 45 poros. Los anillos translúcidos blancos en ellas marcan la posición de los poros. a) Representa una esfera con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa una esfera con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa una esfera con medio el agua y poros rellenos de agua.

su posición.

En primera instancia, se observa la figura a), en la cual, además del punto caliente marcado en la esfera sólida, se tiene una cierta intensidad mayor en los poros marcados que en el material sólido. Se nota una distribución estable de estos, a su vez que se remarca cómo el campo eléctrico interactúa con los poros, aumentando su intensidad en dichos puntos. Además, se observa que al tener esta interacción con los poros, se afecta de igual manera el material alrededor de ellos, dispersándose esta intensidad gradualmente en el material.

Para la figura b), se nota un comportamiento muy similar a la NP de la figura a), siendo el único cambio la intensidad en algunos poros, que es ligeramente menor en los poros rellenos de agua. Sin embargo, en esencia, el campo eléctrico afecta superficialmente de igual manera si los poros están rellenos de aire o agua.

En la NP del inciso c), se nota una gran diferencia respecto a sus contrapartes, ya que tiene una mayor intensidad $|E|$, mostrando una mayor contribución del campo en los poros y sus alrededores. En comparación con las figuras a) y b), no solo se observa un aumento de la intensidad, sino también una distribución diferente del campo, de tal forma que no comparten los mismos puntos de mayor

intensidad en cada poro.

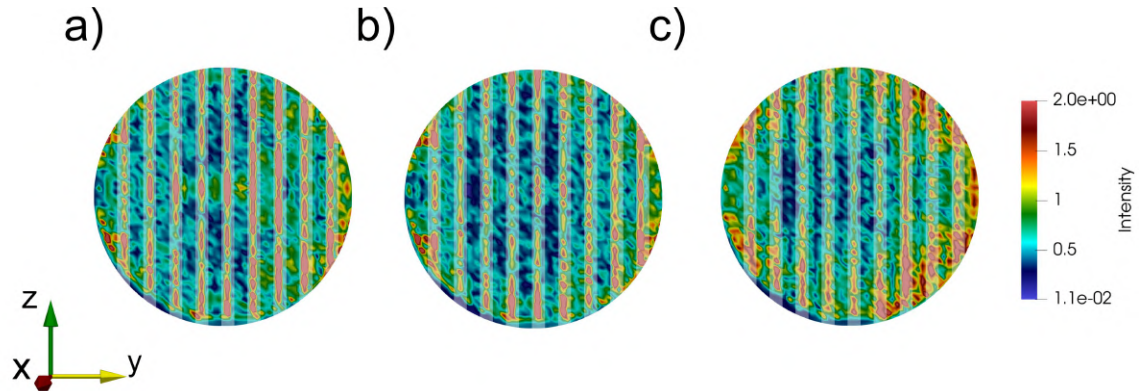


Figura 6.42: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de plata con 45 poros, se realizó un corte transversal en la NP de manera que se observa dentro de la esfera. Las franjas translúcidas blancas remarcen la posición de los poros. a) Representa la sección transversal de una esfera con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa la sección transversal de una esfera con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa la sección transversal de una esfera con medio el agua y poros rellenos de agua.

En la figura 6.42, se muestra la sección transversal de cada NP presentada en la figura 6.41, proporcionando una imagen de cómo se ven los poros en el interior de la esfera de plata porosa correspondiente, los poros están marcados con una franja translúcida de color blanco para ubicar la posición de cada uno.

En la figura a) se observa como el campo dentro de los poros tiene una intensidad muy marcada, de tal forma que el campo eléctrico penetra dentro de cada poro intensificando el campo dentro de la NP. Se denota que la intensidad dentro de cada poro es diferente y entre cada poro, alrededor de sus puntos más intensos, se tiene una excitación del material circundante, de tal forma que se tiene un aumento de $|E|$ dentro de la esfera.

Para la figura b) notamos que tiene una diferencia más marcada con a), de tal manera que se observa la disminución de la intensidad de $|E|$ dentro de los poros. Si bien se nota una penetración del campo y una interacción dentro de la esfera, esta contribución es mucho más marcada cuando los poros están rellenos de aire y no de agua. Por lo que si hay interacción del campo eléctrico dentro de la NP, pero esta no es tan intensa como cuando los poros están rellenos de aire.

Finalmente, para la figura c) se tiene una mayor intensidad del campo eléctrico en comparación con a), pero se diferencia en que la intensidad del campo $|E|$ dentro de los poros no se distribuye uniformemente, quedando solo en las puntas de cada poro, penetrando poco en la parte media excepto en una parte de la NP. Se nota una intensidad grande del campo en las puntas de cada poro, pero sobre todo en los poros de la parte inferior derecha, de tal manera que al ser tan intenso el campo sí se ve penetrado cada poro.

Por lo que para las NPs de plata en las figuras 6.40, 6.41 y 6.42 los poros sí afectan la intensidad del campo eléctrico en la NP, hasta el punto de aumentar la intensidad dentro de la esfera. Comparando las NP rellenas de aire y agua, se tiene que en este caso sí se ve una disminución de la intensidad de $|E|$ cuando los poros están rellenos de agua, siendo que aunque superficialmente se ve una intensidad similar, por dentro se ve una atenuación del campo al cambiar el relleno. Además, se tiene un efecto significativo cuando el medio es diferente. Por lo que se tiene que las esferas con poros ayudan a una penetración del campo eléctrico en comparación con las esferas sólidas, siendo una interacción mayor cuando los poros están rellenos de aire, además de mostrar un cambio en como penetra el campo cuando se cambia medio circundante.

6.4.2. NPs cúbicas con porosidad cilíndrica

NPs de oro

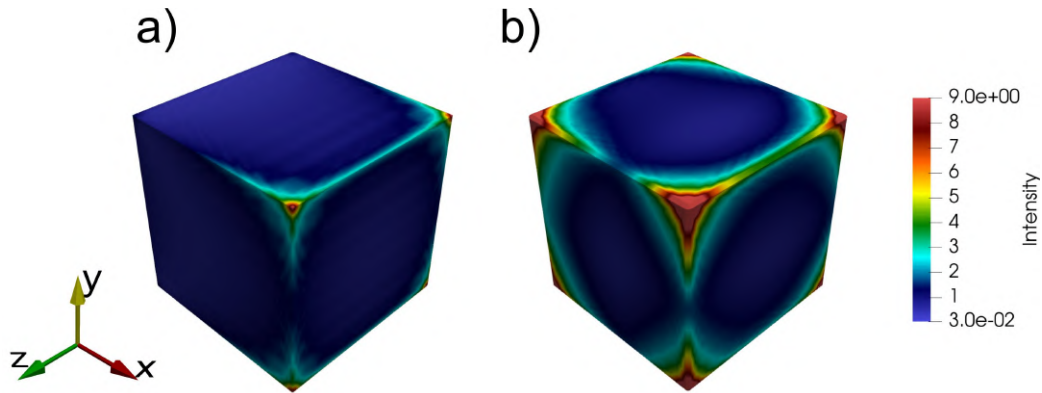


Figura 6.43: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de oro. a) Representa un cubo sólido con medio el aire y b) Representa un cubo sólido con medio el agua.

En la figura 6.43 se observan cubos de oro sólidos los cuales sobre su superficie no se tiene algún punto caliente visible, solamente en sus puntos de mayor intensidad siendo los vértices de los cubos.

Para la figura a) se observan que sus vértices tienen solamente interacción del campo, además de que el campo ligeramente se distribuye en sus aristas. En la figura b) se tiene un cubo inmerso en agua y se nota un campo mucho más intenso de tal forma que sigue el patrón de a) de distribuir el campo por sus aristas. Este efecto en b) es debido a la longitud de onda incidente que al atravesar un medio distinto al aire cambia su índice de refracción.

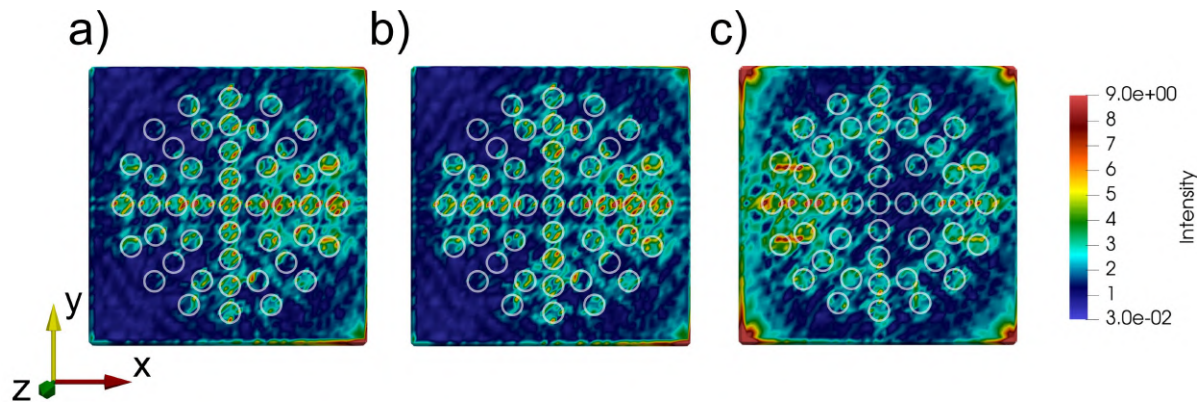


Figura 6.44: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de oro con 45 poros. Los anillos translúcidos blancos en ellas marcan la posición de los poros. a) Representa un cubo con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua y c) Representa un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua.

En la figura 6.44 se muestran las NP de oro en una vista superior, de tal forma que se puedan observar los poros en ellas. Los poros están marcados con anillos translúcidos blancos para indicar su posición.

Para la figura a), en comparación con su versión sólida mostrada en la figura 6.43, se tiene como observación principal que al generar poros, la interacción del campo EM con el material aumenta la intensidad tanto en los poros como en el material que los rodea. De igual manera, se observa que en los vértices de mayor intensidad, los poros más cercanos tienen una mayor interacción con el campo EM, de tal forma que estos poros muestran una mayor intensidad $|E|$.

Cuando se tienen poros rellenos de agua, se observa un comportamiento muy similar al inciso a), de tal forma que se notan pequeños cambios de intensidad, siendo que ahora, en comparación con las esferas, los cubos con poros rellenos de agua tienen una intensidad ligeramente mayor a los rellenos de aire, aunque este comportamiento solo se ve en los poros más cercanos a las aristas.

Por otra parte, la NP con medio de agua y poros rellenos de agua muestra una mayor interacción del campo, siendo que además de tener vértices con una intensidad de campo grande, se tiene una distinción bastante notable del campo generado por los poros. En este cubo se nota una mayor uniformidad en la interacción del campo y los poros. Se puede observar que además de generar una interacción entre el material y los poros, se tiene un comportamiento especial debido a los vértices. Como se notó en las figuras a) y b), en los vértices de mayor intensidad, los poros más cercanos tienen una mayor interacción con el campo EM. En el caso de la figura c), en los cuatro vértices de la cara superior, al tener una intensidad similar, se genera que los poros más alejados del centro tengan una intensidad de $|E|$ mayor a los poros centrales.

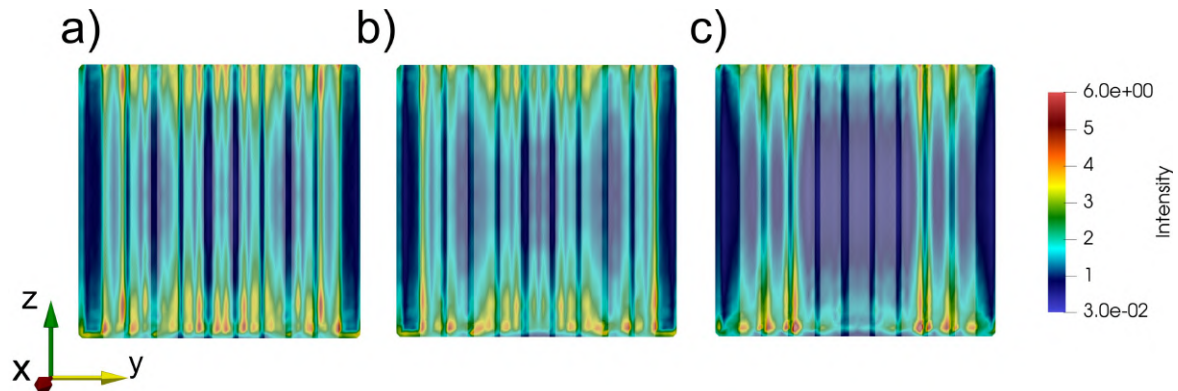


Figura 6.45: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de oro con 45 poros, se realizó un corte transversal en la NP de manera que se observa dentro del cubo. Las franjas translúcidas blancas remarcen la posición de los poros. a) Representa la sección transversal de un cubo con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa la sección transversal de un cubo con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa la sección transversal de un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua.

De las figuras obtenidas en 6.44 al realizar un corte transversal para observar como interacciona el campo eléctrico en los poros se obtiene los cubos mostrados en la figura 6.45 de tal forma que cada uno es correspondiente a su versión presentada en la figura 6.44. Los poros de cada NP están marcados por franjas translúcidas de color blanco.

En la figura a) se observa que cada poro tiene una intensidad $|E|$, siendo en algunos puntos alta en la parte superficial de la NP. El comportamiento de la intensidad $|E|$ muestra que el campo eléctrico, al interactuar con los poros, genera un cambio en la intensidad del material dentro del poro, afectando ligeramente también al material alrededor de cada poro. Esta interacción del campo dentro del poro se caracteriza porque, a medida que se adentra en el poro, la intensidad disminuye, resultando en una menor intensidad en la parte central.

En el inciso b), al comparar con a), se observa que los poros rellenos de agua provocan una menor intensidad $|E|$. A pesar de tener un comportamiento similar entre las NP de a) y b), se nota

que al cambiar el relleno del poro, la intensidad dentro del mismo disminuye cuando el relleno es agua.

En la figura c) se observa el comportamiento mencionado en la figura 6.44, donde en los poros centrales la intensidad del campo es menor en comparación con los poros más cercanos a los vértices. Los poros alejados del centro muestran una intensidad del campo mucho mayor que los vistos en a) y b), además de un comportamiento más uniforme. Sin embargo, a medida que se acercan a los poros centrales, la interacción del campo disminuye notablemente, volviendo a aumentar conforme se alejan del centro de la NP.

Para las NPs de oro mostradas en las figuras 6.43, 6.44 y 6.45 los poros sí afectan la intensidad del campo eléctrico en la NP. Con las NP porosas con relleno del poro agua no se tienen un cambio significativo en la intensidad de $|E|$ en comparación de los poros rellenos de aire, sino que se tiene un efecto significativo cuando el medio es diferente. Por lo que se tiene que los cubos con poros ayudan a la penetración del campo eléctrico, siendo entonces que hay aumento del campo tanto dentro como en la superficie del cubo, de tal manera que como se muestra comparando los cubos sólidos y los cubos porosos, se genera una mayor intensidad $|E|$ en las caras.

NPs de plata

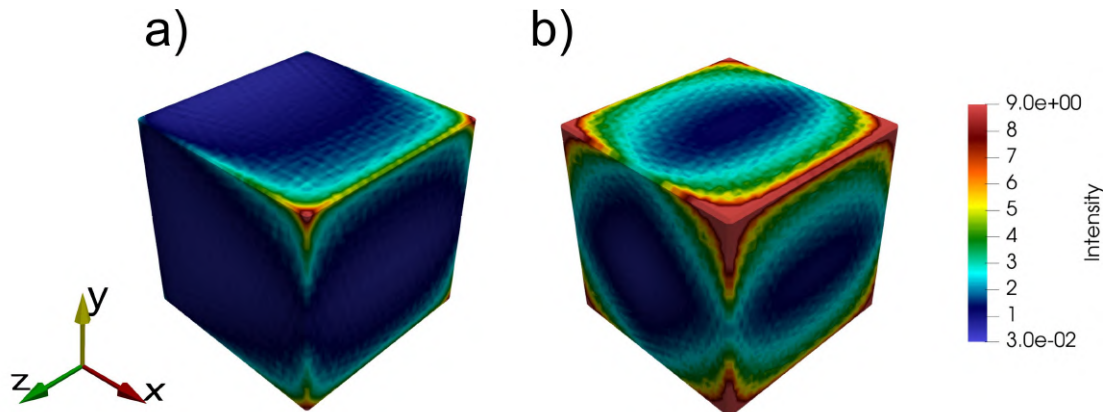


Figura 6.46: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de plata. a) Representa un cubo sólido con medio el aire y b) Representa un cubo sólido con medio el agua.

En la figura 6.46 se observan cubos de plata sólidos, en cuya superficie no se detectan puntos calientes visibles, excepto en los puntos de mayor intensidad, que son los vértices y las aristas de los cubos.

En la figura a) se muestra una intensidad pronunciada en los vértices, y en las aristas se nota la distribución del campo a lo largo de estas. Estas intensidades se concentran principalmente en la cara del cubo xz pero en general solo presentando una intensidad del campo relevante en los vértices.

En la figura b) se observa una intensidad $|E|$ muy alta. Además de los vértices, esta intensidad se distribuye a lo largo de las aristas y de forma radial en las caras, con un aumento de esta intensidad en el centro de las mismas. Este cambio, en comparación con a), solo puede atribuirse al material circundante que es agua en la NP mostrada en b).

En la figura 6.47 se presentan cubos porosos con una vista superior, donde anillos translúcidos blancos demarcan la posición de los poros en las NPs. Como comportamiento general, se observa que al generar poros en el cubo, el campo eléctrico se ve afectado, teniendo una mayor intensidad en su superficie.

En la figura a) se aprecia un aumento considerable del campo debido a los poros. Cada poro tiene una intensidad $|E|$ característica, de tal forma que, al observar la simetría en y a la mitad

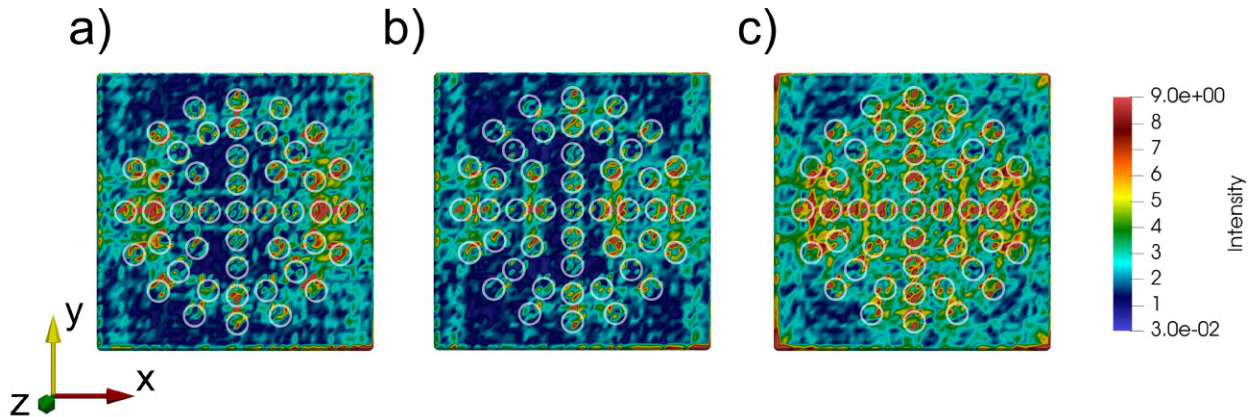


Figura 6.47: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de plata con 45 poros. Los anillos translúcidos blancos en ellas marcan la posición de los poros. a) Representa un cubo con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa un cubo con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua.

de la NP, se presenta el mismo comportamiento en ambos lados. Además, se destaca la intensidad generada en los poros cerca de las aristas verticales, donde los poros alejados del centro muestran la mayor intensidad.

En la figura b), en comparación con a), se muestra una disminución notable en la intensidad $|E|$ generada por los poros rellenos de agua. Aunque en los casos anteriores los resultados de a) y b) son muy similares, en este caso se nota una diferencia significativa en la intensidad, siendo menor incluso en el campo del material alrededor de los poros.

Finalmente, en la figura c), en comparación con a) y b), el cubo presenta un aumento bastante significativo en la intensidad del campo. En la mayoría de la superficie de la cara xy , la intensidad del campo es notable, y el material alrededor de los poros genera un campo bastante intenso. Además, se observa que los poros tienen una intensidad $|E|$ muy alta, lo que resalta significativamente la intensidad de $|E|$ en la NP debido al medio que es el agua.

De las figuras obtenidas en 6.47, al realizar un corte transversal para observar cómo interactúa el campo eléctrico en los poros, se obtienen los cubos mostrados en la figura 6.48. Cada cubo corresponde a su versión presentada en la figura 6.47. Los poros de cada NP están marcados por franjas translúcidas de color blanco.

En primera instancia, la figura a) muestra una intensidad notable en los poros. Al atravesar el poro, la intensidad $|E|$ se concentra principalmente en las paredes de cada poro y en su superficie. Otro comportamiento notable es el aumento de la intensidad en los poros a medida que se alejan del centro, además de que en los poros con mayor intensidad $|E|$, el material alrededor del poro también se ve afectado.

En el inciso b), al comparar con a), se observa que los poros rellenos de agua provocan una menor intensidad $|E|$. Este cambio es bastante notable, especialmente en el centro del cubo donde prácticamente el campo no penetra. Se puede concluir que si los poros están rellenos de agua, la intensidad $|E|$ es menor. El mayor aumento del campo se denota en los poros más alejados del centro; además, principalmente en la parte de los poros que está en la superficie, se nota una $|E|$ menor a medida que se adentra en la NP.

En la figura c), se observa una intensidad muy alta de $|E|$, que aumenta según la distancia del poro al centro, siendo los poros más alejados los que tienen mayor intensidad $|E|$. En este caso, se puede contemplar cómo el campo penetra dentro de los poros, generando una gran intensidad dentro del cubo. A pesar de tener una intensidad muy alta en cada poro, se observa que el campo no penetra uniformemente, disminuyendo la intensidad en los poros centrales a medida que se

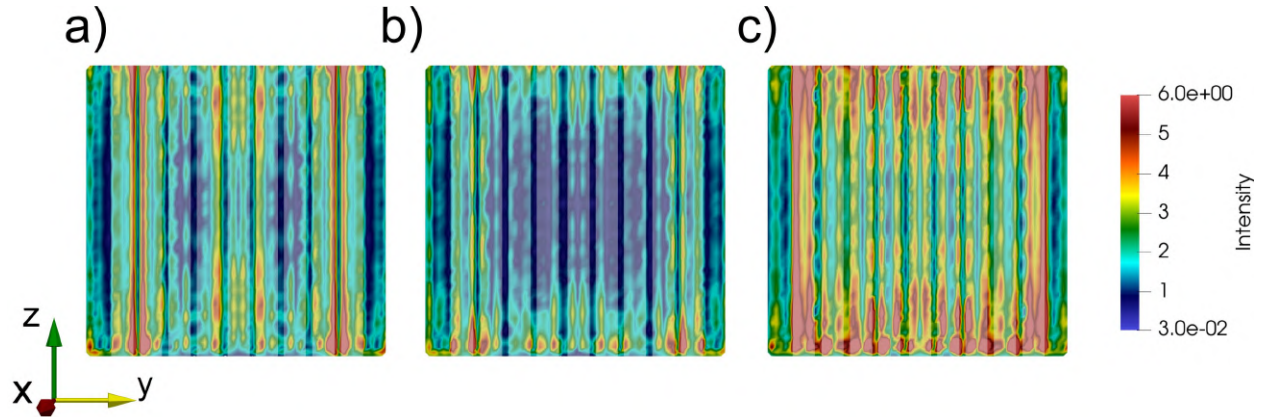


Figura 6.48: Representación tridimensional de la intensidad $|E|$ en NPs de plata con 45 poros, se realizó un corte transversal en la NP de manera que se observa dentro del cubo. Las franjas translúcidas blancas remarcan la posición de los poros. a) Representa la sección transversal de un cubo con medio el aire y poros rellenos de aire, b) Representa la sección transversal de un cubo con medio el aire y poros rellenos de agua y c) Representa la sección transversal de un cubo con medio el agua y poros rellenos de agua.

adentra en la NP. Aun así, la intensidad de $|E|$ es bastante influyente en este caso, esto debido al cambio del medio circundante.

En las NPs de plata presentadas en las figuras 6.46, 6.47 y 6.48, los poros afectan significativamente la intensidad del campo eléctrico en la NP, hasta el punto de aumentar considerablemente la intensidad dentro del cubo. Al comparar las NPs con poros rellenos de aire y agua, se observa una disminución muy marcada de la intensidad $|E|$ cuando los poros están rellenos de agua en comparación con los poros rellenos de aire. Además, se nota un efecto significativo cuando el medio es diferente, ya que la intensidad $|E|$ aumenta considerablemente.

Conclusiones

Para este trabajo se lograron cumplir los objetivos propuestos, llegando al punto de lograr resultados interesantes, dejando así el tópico abierto a una exploración a mayor profundidad y con diversos puntos a probar. De igual forma a continuación se presentan las conclusiones más importantes del trabajo, en los resultados se detallaron a profundidad los resultados obtenidos.

En primer lugar este trabajo se logró representar NPs porosas utilizando un código desarrollado específicamente para este propósito. El programa cumple con los objetivos planteados, permitiendo la creación de NP porosas de manera flexible y adaptable, respetando los estilos de programación de PEP8 y siendo compatible con DDSCAT, llegando al punto de ser una herramienta de gran utilidad en futuras investigaciones.

6.5. Eficiencias ópticas

Para las esferas con poros cilíndricos, se observó un control estable y un comportamiento predecible, destacándose un aumento en la absorción, siendo más notable en esferas con 29 y 45 poros de radio $r = 5$ nm. Por su parte las esferas con poros esféricos distribuidos aleatoriamente mostraron cambios bastante notables en las eficiencias ópticas, sobre todo la absorción, sin embargo, no se tiene control y hay mayor dificultad para determinar las razones detrás de estos resultados.

Para los cubos con poros cilíndricos, los cambios en las eficiencias ópticas fueron evidentes a partir de los 29 poros. En NPs con menos de 29 poros, las líneas espectrales se comportaban de manera similar a las NPs sólidas.

La diferente morfología de las NPs no afectó tanto como se esperaba, lo que podría deberse al tamaño de los poros y a los materiales utilizados (oro y plata). Los cambios fueron más pronunciados en la plata, mientras que en el oro fueron menos evidentes debido a sus funciones dieléctricas, además, el tipo de polarización del campo incidente no generó una diferencia notable entre los resultados. De tal manera que se puede concluir entonces que las NPs tanto cúbicas y esféricas tienen una mejor respuesta en sus eficiencias en cuanto la porosidad es mayor entre cada una de ellas, aunque, el que no haya un cambio tan grande en las eficiencias ópticas cuando se agregan poros puede ser una ventaja debido a que se pueden rellenar los poros de algún compuesto químico de tal forma que la NP conserve sus propiedades similares a una NP sólida, esto es útil en medicina en el transporte de medicinas y aún más siendo tanto el oro y la plata metales nobles.

6.6. Presión por radiación

Los resultados sobre la presión por radiación mostraron comportamientos interesantes en la fuerza generada de tal manera que se tiene un espectro de fuerzas bastante variable ya que se generan fuerza de arrastre y empuje en un rango de longitudes de onda muy pequeño, además de que los resultados para cada NP tanto sólida como porosa muestran una falta de convergencia entre sí tanto para diferentes materiales como morfologías de las NPs o polarización del campo incidente. Sin embargo, se encontró un comportamiento estable en el rango de longitudes de onda de 300 a 400 nm. Para longitudes de onda mayores, las diferencias entre las NP eran más pronunciadas,

sin encontrar una relación entre cada una. En longitudes de onda muy energéticas (entre 1 y 10 nm), se observaron fuerzas de empuje y arrastre bastante variadas con respecto a la longitud de onda, en estos resultados se puede observar que no se encontró alguna relación o cambio debido a la morfología o el material de las NP que se pueda cualificar pero los resultados indican un comportamiento lógico dentro de cierto rango ya si se encuentra un empuje o arrastre pero este es casi imperceptible por las unidades de la fuerza que están en el rango de atto Newtons ($10^{-18} \times N$).

6.7. Campo cercano

El análisis del campo cercano mostró que los poros en las NP influyen significativamente en el campo eléctrico, incrementándolo en las regiones donde se encuentran los poros expuestos. Además, se observó que el campo, al incidir en las NP porosas, penetra a través de los poros, generando un aumento del campo dentro de las NP porosas. En estos resultados se tiene un cambio bastante notable en la intensidad $|E|$ debido a la morfología ya que los cubos presentaban una mayor intensidad que las esferas. De igual forma estos resultados son bastante prometedores ya que pueden generar un aumento de la intensidad del campo sin hacer incidir más energía y solo debido a la morfología.

6.8. Trabajos futuros

El tema de las NP porosas es muy interesante y aún puede seguir en estudio debido a todas las variables a tratar ya que como se observó se obtuvieron resultados muy interesantes y prometedores. Esta morfología podría ir aún en estudio de tal forma que se tengan avances más significativos con más variables a experimentar no solo teóricamente si no experimentalmente. Como parte de este trabajo algunas variables a considerar en la continuación sería

- Probar con tamaños y morfologías de la NP diferentes.
- Probar con materiales diferentes de la NP y el poro.
- Hacer comparaciones de los resultados con pruebas experimentales.
- Obtener otro tipo de resultados como la torca ejercida, campo magnético o como agente químicos.
- Realizar aplicaciones para campos como medicina o electrónica.

Apéndice A

Figura

En la sección 5.5.8 se hace énfasis en la herencia de código para generar la forma de cada NP. Para este trabajo se programaron dos tipos de forma de las NP, las esferas y cubos, para cada uno se presentan a continuación escritas en Python y con la herencia de la clase *Nanopartícula*

A.1. Esfera

```
1 class Esfera(Nanopartícula):
2     '''
3     Clase para la creación de una esfera discretizado que hereda de la clase padre
4     Nanopartícula sus metodos y atributos
5     '''
6     def Figura(self, medida:float):
7         '''
8         Función para la determinación de la forma y características del cubo
9         '''
10        espacio = 2 * medida
11        points = np.mgrid[-espacio:espacio, -espacio:espacio, -espacio:espacio].
12        reshape(3, -1).T
13        indices = (points[:, 0]**2 + points[:, 1]**2 + points[:, 2]**2) <= medida
14        **2 #Ecuación canonica de la esfera para su discretización
15        matriz_puntos = np.column_stack((points[indices], np.ones((np.count_nonzero
16        (indices), 3))))
17        matriz_indices = np.arange(1, matriz_puntos.shape[0] + 1).reshape(-1, 1)
18        volumen_esfera = 4/3 * np.pi * (medida ** 3)
19        matriz_puntos_esfera = np.concatenate((matriz_indices, matriz_puntos), axis
20        =1)
21
22        return matriz_puntos_esfera, volumen_esfera
23
24 def MarcarCoincidencias(self, matriz_puntos_esfera, puntos_poro):
25     return super().MarcarCoincidencias(matriz_puntos_esfera, puntos_poro)
26
27 def Poros(self, medida:float, poros: int, forma:str, matriz_puntos_esfera):
28     return super().Poros(medida, poros, forma, matriz_puntos_esfera)
29
30 def Graficar(self, grafica:bool, matriz_puntos_esfera):
31     return super().Graficar(grafica, matriz_puntos_esfera)
32
33 def Conteo(self, vol:bool, medida: float, matriz_puntos_esfera, volumen_esfera)
34 :
35     return super().Conteo(vol, medida, matriz_puntos_esfera, volumen_esfera)
```

```

33
34 def Archivo(self, medida:float, archivo:bool, matriz_puntos_esfera,
volumen_aproximado):
35     return super().Archivo(medida, archivo, matriz_puntos_esfera,
volumen_aproximado)

```

A.2. Cubo

```

1 class Cubo(Nanoparticula):
2     '''
3     Clase para la creación de un cubo discretizado que hereda de la clase padre
Nanoparticula sus metodos y atributos
4     '''
5     def Figura(self, medida:float):
6         '''
7         Función para la determinación de la forma y características del cubo
8         '''
9         lado = medida/2
10        espacio = medida
11        volumen_cubo = (medida)**3
12        points = np.mgrid[-espacio:espacio, -espacio:espacio, -lado:lado + 1].
reshape(3, -1).T
13        indices = np.logical_and(
14            np.abs(points[:, 0]) <= lado,
15            np.abs(points[:, 1]) <= lado,
16            np.abs(points[:, 2]) <= lado) #Creación de la forma
17        matriz_puntos = np.column_stack((points[indices], np.ones((np.count_nonzero
(indices), 3))))
18        matriz_indices = np.arange(1, matriz_puntos.shape[0] + 1).reshape(-1, 1)
19        matriz_puntos_cubo = np.concatenate((matriz_indices, matriz_puntos), axis
=1)
20
21        return matriz_puntos_cubo, volumen_cubo
22
23    def MarcarCoincidencias(self, matriz_puntos_cubo, puntos_poro):
24        return super().MarcarCoincidencias(matriz_puntos_cubo, puntos_poro)
25
26    def Poros(self, medida:float, poros: int, forma:str, matriz_puntos_cubo):
27        return super().Poros(medida, poros, forma, matriz_puntos_cubo)
28
29
30    def Graficar(self, grafica:bool, matriz_puntos_cubo):
31        return super().Graficar(grafica, matriz_puntos_cubo)
32
33    def Conteo(self, vol, medida, matriz_puntos_cubo, volumen_cubo):
34        return super().Conteo(vol, medida, matriz_puntos_cubo, volumen_cubo)
35
36    def Archivo(self, medida:float, archivo:bool, matriz_puntos_cubo,
volumen_aproximado):
37        return super().Archivo(medida, archivo, matriz_puntos_cubo,
volumen_aproximado)

```

Apéndice B

ddscat.par

Uno de los archivos principales en el cual se pueden configurar las instrucciones de cálculos del software DDSCAT es en el archivo ddscat.par. Dicho archivo es presentado a continuación.

```
1 '=====  
2 '**** Preliminaries ****'  
3 Torca = CMTORQ*6 (DOTORQ, NOTORQ) -- either do or skip torque calculations  
4 'PBCGS2' = CMDSOL*6 (PBCGS2, PBCGST, GPBICG, QMRCCG, PETRKP) -- CCG method  
5 'GPFAFT' = CMETHD*6 (GPFAFT, FFTMKL) -- FFT method  
6 'GKDLDR' = CALPHA*6 (GKDLDR, LATDDR, FLTRCD) -- DDA method  
7 'NOTBIN' = CBINFLAG (ALLBIN, ORIBIN, NOTBIN)  
8 '**** Initial Memory Allocation ****'  
9 65 65 65 = dimensioning allowance for target generation  
10 '**** Target Geometry and Composition ****'  
11 'FROM_FILE' = CSHAPE*9 shape directive  
12 no SHPAR parameters needed  
13 2 = NCOMP = number of dielectric materials  
14 'Funcion dielectrica 1' = file with refractive index 1.47  
15 'Funcion dielectrica 2' = file with refractive index 1.00  
16 '**** Additional Nearfield calculation? ****'  
17 Campo = NRFLD (=0 to skip nearfield calc., =1 to calculate nearfield E)  
18 0.3 0.3 0.3 0.3 0.3 0.3 (fract. extens. of calc. vol. in -x,+x,-y,+y,-z,+z)  
19 '**** Error tolerance ****'  
20 1.00e-4 = TOL |= MAX ALLOWED (NORM OF |G>=AC|E>-ACA|X>)/(NORM OF AC|E>)  
21 '**** maximum number of iterations allowed ****'  
22 8000 = MXITER  
23 '**** Interaction cutoff parameter for PBC calculations ****'  
24 1.00e-2 = GAMMA (1e-2 is normal, 3e-3 for greater accuracy)  
25 '**** Angular resolution for calculation of <cos>, etc. ****'  
26 0.5 = ETASCA (number of angles is proportional to [(3+x)/ETASCA]^2 )  
27 '**** Wavelengths (micron) ****'  
28 Longitud de onda inicial, final y sus divisiones 'LIN' = wavelengths (first, last, how many  
    , how=LIN,INV,LOG,TAB)  
29 '**** Refractive index of ambient medium'  
30 Función dielectrica del ambiente = NAMBIENT  
31 '**** Effective Radii (micron) **** '  
32 Radio efectivo 1 'LIN' = eff. radii (first, last, how many, how=LIN,INV,LOG)  
33 '**** Define Incident Polarizations ****'  
34 (0,0) (1.,0.) (0.,0.) = Polarization state e01 (k along x axis)  
35 1 = IORTH (=1 to do only pol. state e01; =2 to also do orth. pol. state)  
36 '**** Specify which output files to write ****'  
37 Archivo sca = IWRKSC (=0 to suppress, =1 to write ''sca'' file for each target  
    orient)  
38 '**** Specify Target Rotations ****'  
39 0. 0 1 = BETAMI, BETAMX, NBETA (beta=rotation around a1)  
40 0. 0 1 = THETMI, THETMX, NTHETA (theta=angle between a1 and k)  
41 0. 0. 1 = PHIMIN, PHIMAX, NPHI (phi=rotation angle of a1 around k)
```

```

42 '**** Specify first I WAV, IRAD, IORI (normally 0 0 0) ****'
43 0 0 0 = first I WAV, first IRAD, first IORI (0 0 0 to begin fresh)
44 ' ****Select Elements of S_ij Matrix to Print**** '
45 1 = NSMELTS = number of elements of S_ij to print (not more than 9)
46 11 = indices ij of elements to print
47 '**** Specify Scattered Directions ****'
48 'LFRAME' = CMDFRM (LFRAME, TFRAME for Lab Frame or Target Frame)
49 2 = NPLANES = number of scattering planes
50 0. 0. 180. 5 = phi, thetan_min, thetan_max, dtheta (in degrees) for plane 1
51 90. 0. 180. 5 = phi, ... for plane 2

```

Para este trabajo, se destacan ciertas instrucciones en las líneas que son necesarias de acuerdo con el cálculo requerido; en las líneas presentadas, las instrucciones de interés se encuentran subrayadas.

En la línea 3, **Torca** hace énfasis en el cálculo de la torca para obtener resultados de presión por radiación, en caso de requerir dichos cálculos se escribe '**DOTORQ**'; mientras que, en caso contrario se escribe '**NOTORQ**'. Si se tiene '**DOTORQ**' es necesario también que en la línea 37 **Archivo sca** tenga valor 1 para obtener los archivos donde se escriban los cálculos, de no necesitarlos este se deja con valor 0.

En la línea 14 y 15, **Función dieléctrica 1** y **Función dieléctrica 2**, se tratan de las funciones dieléctricas de los materiales; en este caso la función dieléctrica 1 es aquella que identifica el material de NP a usar y la función dieléctrica 2 es el material de los poros. El software reconoce que función dieléctrica usar en cada punto dependiendo de su identificador en las coordenadas. Para incorporar las funciones dieléctricas, deben estar en la misma carpeta que este archivo y nombrarlas de manera correspondiente; utilizando el nombre de la función dieléctrica es introducido en las líneas correspondientes.

En el caso de calcular el campo cercano de la NP, en la línea 37 **Campo** se debe tener el valor 1; de no necesitar el cálculo del campo se deja en 0.

En **Longitud de onda inicial, final y sus divisiones** línea 28, se encuentran las longitudes de onda incidentes para cada cálculo, especificando la longitud de onda inicial, la longitud de onda final y la cantidad de divisiones en las que se dividirá dicho rango de longitudes de onda. Esta función permite controlar las ondas incidentes, así como el rango de estas.

Modificando la línea 30 **Función dieléctrica del ambiente**, se puede cambiar el medio donde se encuentra simulada la NP.

En la línea 32 **Radio efectivo**, se trata del radio efectivo de la NP a simular, en este caso como no cambia el radio efectivo se debe colocar de la siguiente manera: $a_{eff} a_{eff}$

En la línea 34, se especifica la polarización de la onda incidente, la cual puede ser configurada de varias maneras, incluyendo polarización circular. Sin embargo, para este caso, se utilizarán polarizaciones en los ejes y y z , definidas como (0,0) (1.,0.) (0.,0.) y (0,0) (0.,0.) (1.,0.), respectivamente.

Dependiendo del cálculo y los parámetros a simular de la NP, se realiza una modificación en el archivo en la línea correspondiente. En este trabajo, las líneas explicadas son las más relevantes.

Apéndice C

shape.dat

Para que DDSCAT pueda simular las morfologías que desea el usuario, es necesario el archivo *shape.dat*. En este archivo se almacenan las coordenadas tridimensionales de la figura simulada por dipolos puntuales, donde cada coordenada es caracterizada según el material.

El archivo cuenta con un preámbulo del cual seguidamente se introducen 7 columnas las cuales son organizadas respectivamente como: número del dipolo, coordenada x del dipolo, coordenada y del dipolo, coordenada z del dipolo y (1 1 1) o (2 2 2) según el material del dipolo. De esta manera se introduce todo lo que caracteriza a la NP a simular.

El preámbulo es dado por DDSCAT y en sus primeras líneas cuenta con una descripción del archivo, seguido del número de dipolos y finalmente con características para la generación de la figura. Este se demuestra a continuación escrito en Python para modificarlo dependiendo de las características de la figura mencionadas en 5.5.

```
1 Preambulo = [f'---{self.__class__.__name__} de medida {self.medida} para simular {
    tamaño_m}µm, {self.poros} poros de forma {self.forma} ---',
2     f'{matriz_puntos_figura.shape[0]} = NAT',
3     '1.000 0.000 0.000 = target vector a1 (in TF)',
4     '0.000 1.000 0.000 = target vector a2 (in TF)',
5     '1. 1. 1. = d_x/d d_y/d d_z/d (normally 1 1 1)',
6     '0.5 0.5 0.5 = X0(1-3) = location in lattice of ''target origin'',
7     'J JX JY JZ ICOMPX,ICOMPY,ICOMPZ']
```

En la descripción del preámbulo se describe la NP a simular, iniciando con su forma, tamaño de la figura y tamaño de la NP; el número de poros y su forma.

Apéndice D

Código para la extracción de resultados de presión por radiación

Este código fue diseñado para la extracción de datos para los archivos de salida de DDSCAT con terminación *.sca*, dichos archivos son proporcionados cuando se requiere el cálculo de presión por radiación.

Al extraer dichos datos se crea un archivo de texto donde se almacenan en una matriz de de 5 columnas y se realizan las operaciones de cálculo de la fuerza ejercida por la presión por radiación.

```
1 from pathlib import Path
2 import numpy as np
3
4 # Ruta al directorio actual
5 path = Path.cwd()
6 archivo_nombre_1 = 'w00'
7 archivo_nombre_2 = 'r000k000.sca'
8
9 carpetas = [carpeta for carpeta in path.iterdir() if carpeta.is_dir()]
10
11 Titulos = ['Nombre ', 'wave ', 'q_ext ', 'q_sca*g(1) ', 'F_rad\n']
12 file1 = open('Fuerza.txt', 'w')
13 file1.writelines(Titulos)
14
15 # Imprime el nombre de las carpetas
16 for carpeta in carpetas:
17     i = 0
18     # Letra con la que quieres que empiecen los archivos
19     letra_inicial = 'w'
20
21     # Filtra los archivos que comienzan con la letra deseada
22     archivos_con_letra = [archivo for archivo in carpeta.iterdir() if archivo.
23 is_file() and archivo.name.startswith(letra_inicial)] # noqa: E501
24     archivos_con_letra.sort()
25
26     # Cuenta el número de archivos encontrados
27     número_de_archivos = len(archivos_con_letra)
28     número_de_archivos = int(número_de_archivos / 3)
29     print(número_de_archivos)
30
31     for _ in range(número_de_archivos):
32         número = f'{i}'
33         archivo_nombre = archivo_nombre_1 + número + archivo_nombre_2
34         i += 1
35         print(i)
36         path_directorio = carpeta / archivo_nombre # Utiliza carpeta en lugar de
37         path
```

Código para la extracción de resultados de presión por radiación

```
36     # Leer el contenido del archivo en una lista de líneas
37     with path_directorio.open() as f:
38         líneas = f.readlines()
39     if líneas[12][2:7] == 'AEFF=':
40         name_f = carpeta.name # Utiliza carpeta.name en lugar de carpeta
41         a_eff = float(líneas[12][14:22]) * 10**(-6) # Unidades de metros
42         wave = float(líneas[13][14:22]) * 10**3 # Nanometros
43         q_ext = float(líneas[35][9:19])
44         q_sca_g = float(líneas[37][9:19])
45         q_pr = q_ext - q_sca_g
46         eps_medium = 8.8542 * 10**(-12) # Permitividad del medio en unidades
de C/V m del vacío # noqa: E501
47         u_rad = eps_medium * ((1 * 299.79 * 10**2)**2) / (8 * np.pi) #
Unidades de (volts/metro)**2 # noqa: E501
48         F_rad = q_pr * np.pi * (a_eff**2) * (u_rad) # Unidades de Newton
49         datos = [name_f, wave, q_ext, q_sca_g, F_rad]
50         file1.writelines([str(d) + ' ' for d in datos])
51         file1.write('\n') # Agrega una línea nueva al final de cada conjunto
de datos # noqa: E501
52
53 file1.close()
```

Bibliografía

- [1] VAJTAI R., *Springer Handbook of Nanomaterials*, Springer eBooks (1.a ed.), 2013. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-20595-8>
- [2] NIMI, N., PAUL, W. & SHARMA, C.P., *Blood protein adsorption and compatibility studies of gold nanoparticles*, Gold Bull 44, 15–20, 2011. <https://doi.org/10.1007/s13404-010-0001-6>
- [3] WU, Q., PENG, R., LUO, Y., CUI, Q., ZHU, S., & LI, L., *Antibacterial Activity of Porous Gold Nanocomposites via NIR Light-Triggered Photothermal and Photodynamic Effects*, ACS Applied Bio Materials, 2021. <https://doi.org/10.1021/acsabm.1c00318>
- [4] HUANG, C. W., HAO, Y., NYAGILO, J. O., DAVÉ, D. P., XU, L., AND SUN, X. K., *Porous Hollow Gold Nanoparticles for Cancer SERS Imaging*, Journal of Nano Research, 2010
- [5] JIANG, R., XU, W., WANG, Y., & YU, S., *Tunable porous silver nanostructures for efficient surface-enhanced Raman scattering detection of trace pesticide residues*, New Journal Of Chemistry, 42(21), 17750-17755, 2018. <https://doi.org/10.1039/c8nj04060e>
- [6] BAHAR, N., & EKINCI, D., *Hollow Porous Gold nanoparticle/reduced graphene oxide composite films for electrochemical supercapacitor applications*, Electrochimica Acta, 337, 135844, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2020.135844>
- [7] DETSI, E., PUNZHIN, S., ONCK, P., & DE HOSSON, J., *Direct synthesis of metal nanoparticles with tunable porosity*, Journal Of Materials Chemistry, 22(11), 4588, 2012. <https://doi.org/10.1039/c2jm15801a>
- [8] JUHÁSZ, L., PARDITKA, B., SHENOUDA, S., KADOI, M., FUKUNAGA, K., ERDÉLYI, Z., & CSERHÁTI, C, *Morphological and in situ local refractive index change induced tuning of the optical properties of titania coated porous gold nanoparticles*, Journal Of Applied Physics, 128(5), 2020. <https://doi.org/10.1063/5.0010460>
- [9] KOSINOVA, A., WANG, D., BARADÁCS, E., PARDITKA, B., KUPS, T., KLINGER, L., ERDÉLYI, Z., SCHAAF, P., & RABKIN, E., *Tuning the nanoscale morphology and optical properties of porous gold nanoparticles by surface passivation and annealing*, Acta Materialia, 127, 108-116, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.01.014>
- [10] NOGUEZ, C., VILLAGÓMEZ, C. J., & GONZÁLEZ, A. L., *Plasmonics of multifaceted metallic nanoparticles, field enhancement, and TERS*, Physica Status Solidi. B, Basic Research, 252(1), 56-71, 2014. <https://doi.org/10.1002/pssb.201350416>
- [11] ROBERT, L., & BURWELL, JR., *Manual of Symbols and Terminology for Physicochemical Quantities and Units, Appendix II: Definitions, Terminology and Symbols in Colloid and Surface Chemistry. Pure And Applied Chemistry*, Pure And Applied Chemistry, 31(4) PERGAMON PRESS OXFORD NEW YORK PARIS FRANKFURT, 1975. <https://doi.org/10.1351/pac197231040577>

- [12] ROUQUEROL, J., AVNIR, D., FAIRBRIDGE, C. W., EVERETT, D. H., HAYNES, J. M., PERNICONE, N., RAMSAY, J. D. F., SING, K. S. W., & UNGER, K. K., *Recommendations for the characterization of porous solids (Technical Report)*, Pure And Applied Chemistry, 66(8), 1739-1758, 1994. <https://doi.org/10.1351/pac199466081739>
- [13] SARNA-BOŚ, K., SKIC, K., SOBIESZCZAŃSKI, J., BOGUTA, P., & CHAŁAS, R., *Contemporary Approach to the Porosity of Dental Materials and Methods of Its Measurement*, International Journal Of Molecular Sciences, 22(16), 8903, 2021. <https://doi.org/10.3390/ijms221689039>
- [14] BENNETT, T. D., COUDERT, F., JAMES, S. L., & COOPER, A. I., *The changing state of porous materials*, Nature Materials, 20(9), 1179-1187, 2021. <https://doi.org/10.1038/s41563-021-00957-w>
- [15] MAIER, S. A., *Plasmonics: Fundamentals and Applications*, Springer Verlag, 2007. ISBN 978-0-387-33150-8
- [16] NOGUEZ, C., *Optical properties of isolated and supported metal nanoparticles*, Optical Materials, 27(7), 1204-1211, 2005. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2004.11.012>
- [17] GONZÁLEZ, A. L., & NOGUEZ, C., *Influence of Morphology on the Optical Properties of Metal Nanoparticles*, Journal Of Computational And Theoretical Nanoscience, 4(2), 231-238, 2007. <https://doi.org/10.1166/jctn.2007.2309>
- [18] GONZÁLEZ, A. L., *Propiedades ópticas de nanopartículas metálicas [Tesis doctorado]*, UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO, 2007.
- [19] HECHT, E., *Optics*, 5e. Pearson Education, 2017.
- [20] GRIFFITHS, D. J., *Introduction to Electrodynamics*, Cambridge University Press, 2017.
- [21] JACKSON, J. D., *Classical electrodynamics*, John Wiley & Sons, 1999.
- [22] PEDIREDDY, S., LEE, H. K., TJIU, W. W., PHANG, I. Y., TAN, H. R., CHUA, S. Q., TROADEC, C., & LING, X. Y., *One-step synthesis of zero-dimensional hollow nanoporous gold nanoparticles with enhanced methanol electrooxidation performance*, Nature Communications, 5(1), 2014. <https://doi.org/10.1038/ncomms5947>
- [23] LIANG, M., HARDER R. & ROBINSON I., *Radiation-driven rotational motion of nanoparticles*, J. Synchrotron Rad. 25, 757-762, 2018. <https://doi.org/10.1107/S1600577518005039>
- [24] DRAINE, B.T., & FLATAU, P.J., "Discrete dipole approximation for scattering calculations", J. Opt. Soc. Am. A, 11, 1491-1499, 1994.
- [25] YURKIN, M. A., & HOEKSTRA, A. G., *The discrete dipole approximation: An overview and recent developments*, Journal Of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 106(1-3), 558-589, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2007.01>
- [26] SINGHAM, S. B., & SALZMAN, G., *Evaluation of the scattering matrix of an arbitrary particle using the coupled dipole approximation*, The Journal Of Chemical Physics, 84(5), 2658-2667, 1986. <https://doi.org/10.1063/1.450338>
- [27] MATTHES, E., *Python Crash Course: A Hands-On, Project-Based Introduction to Programming* The Journal Of Chemical Physics, 2015 <http://202.62.95.70:8080/jspui/handle/123456789/13318>

- [28] ROSSUM, G., WARSAW, B. & COGHLAN A., *PEP 8 – Style Guide for Python Code* peps.python.org. (s.f.). Python Enhancement Proposals (PEPs), 2001 <https://peps.python.org/pep-0008/>
- [29] PETERS, T., *PEP 20 – The Zen of Python* peps.python.org. Python Enhancement Proposals (PEPs), 2004 <https://peps.python.org/pep-0020/>
- [30] HARRIS, C.R., MILLMAN, K.J., VAN DER WALT, S.J. ET AL., *Array programming with NumPy* *Nature* 585, 357–362, 2020 <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>
- [31] HUNTER J. D., *Matplotlib: A 2D Graphics Environment* *Computing in Science & Engineering*, no. 3, pp. 90-95, 2007 <https://doi.org/10.5281/zenodo.11201097>
- [32] GUO, M., HE, J., LI, Y., MA, S., & SUN, X., *One-step synthesis of hollow porous gold nanoparticles with tunable particle size for the reduction of 4-nitrophenol*, *Journal Of Hazardous Materials*, 310, 89-97, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2016.02.016>
- [33] JOHNSON, P. B. & CHRISTY R. W., *Optical constants of the noble metals*, *Phys. Rev. B* 6, 4370-4379, 1972. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>