



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Caracterización de la resonancia plasmónica superficial en
nanopartículas elipsoidales de oro y plata

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA APLICADA

por

Jonathan Ramírez Aragón

Asesorado por

Dr. Maximino Luis Arroyo Carrasco

Puebla Pue.

16 de noviembre de 2021



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Caracterización de la resonancia plasmónica superficial en
nanopartículas elipsoidales de oro y plata

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA APLICADA

por

Jonathan Ramírez Aragón

Asesorado por

Dr. Maximino Luis Arroyo Carrasco

Puebla Pue.

16 de noviembre de 2021

Título: Caracterización de la resonancia plasmónica superficial en nanopartículas elipsoidales de oro y plata

Estudiante: JONATHAN RAMÍREZ ARAGÓN

COMITÉ

Dra. Marcela Maribel Méndez Otero
Presidente

Dra. Emma Vianey García Ramírez
Secretario

Dr. Ricardo Téllez Limón
Vocal

Dr. Maximino Luis Arroyo Carrasco
Asesor

Índice general

| | |
|---|-------------|
| Resumen | XIII |
| Introducción | XV |
| 1. Marco Teórico | 1 |
| 1.1. Electrodinámica | 1 |
| 1.1.1. Ecuaciones de Maxwell | 1 |
| 1.1.2. Relación de dispersión | 2 |
| 1.2. Función dieléctrica para un gas de electrones libre. | 3 |
| 1.3. Índice de refracción complejo | 4 |
| 1.4. Absorción y esparcimiento por partículas arbitrarias | 4 |
| 1.4.1. Parámetros de Stokes | 6 |
| 1.4.2. Matrices de Müller | 8 |
| 1.4.3. Extinción, esparcimiento y absorción | 8 |
| 1.5. Plasmones localizados de superficie | 9 |
| 1.5.1. Aproximación cuasiestática | 9 |
| 2. Generación de LSP en nanopartículas metálicas elipsoidales | 11 |
| 2.1. Plasmones de superficie localizados en una nanopartícula esférica | 11 |
| 2.2. Plasmones de superficie localizados en una nanopartícula elipsoidal | 13 |
| 2.2.1. Sistema de coordenadas elipsoidal | 13 |
| 2.2.2. Simetrías del potencial eléctrico para una nanopartícula elipsoidal | 15 |
| 2.2.3. Cálculo del potencial eléctrico para una nanopartícula elipsoidal | 15 |
| 2.2.4. Notación tensorial para el momento dipolar \mathbf{P} | 19 |
| 2.2.5. Soluciones particulares para la generación de plasmones de superficie en nanopartículas elipsoidales | 20 |
| 3. Efectos en la generación de LSP en NP's esféricas debido a su tamaño, composición y orientación | 23 |
| 3.1. Generación de LSP en nanopartículas esféricas en función de su radio | 23 |
| 3.2. Generación de LSP en nanopartículas esféricas en función de su tamaño | 24 |
| 3.2.1. Nanopartículas Oblatas | 25 |
| 3.2.2. Nanopartículas Prolatas | 31 |
| 3.3. Generación de LSP en diversas configuraciones | 36 |
| 3.3.1. Nanopartículas Oblatas | 36 |
| 3.3.2. Nanopartículas Prolatas | 41 |
| 3.3.3. LSP en nanopartículas elipsoidales inmersas en diversos dieléctricos | 46 |
| 4. Conclusiones y trabajo futuro | 49 |

| | |
|---|-----------|
| A. Solución a las integrales L_1 para nanopartículas esferoidales | 51 |
| A.1. Nanopartículas oblatas | 51 |
| A.2. Nanopartículas prolatas | 52 |

Índice de tablas

| | |
|--|----|
| 3.1. Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de plata. | 29 |
| 3.2. Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de oro. | 30 |
| 3.3. Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas prolatas de plata. | 34 |
| 3.4. Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas prolatas de oro. | 35 |
| 3.5. Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de oro. | 40 |
| 3.6. Longitud de onda teórica que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas prolatas de oro. | 45 |
| 3.7. Longitud de onda teórica que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de plata. | 46 |
| 3.8. Longitud de onda teórica que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de oro. | 47 |

Índice de figuras

| | |
|--|----|
| 1.1. Sistema de coordenadas empleado para la descripción del esparcimiento de luz por una partícula arbitraria. | 5 |
| 1.2. Configuración para determinar el segundo parámetro de Stockes. | 7 |
| 1.3. Configuración para determinar el tercer parámetro de Stockes. | 7 |
| 1.4. Configuración para determinar el cuarto parámetro de Stockes. | 8 |
| 1.5. Nanopartícula con permitividad ϵ inmersa en un dieléctrico ϵ_m iluminada por una onda monocromática de longitud de onda λ | 10 |
| 2.1. Familia de superficies descritas por las ecuaciones (2.20) a (2.22). | 14 |
| 2.2. Elipsoide centrada en el origen cuyos semiejes $a = 5$, $b = 4$ y $c = 3$ están alineados al sistema de coordenadas cartesiano x , y y z respectivamente. | 20 |
| 2.3. Esferoide oblata centrada en el origen cuyos semiejes $a = 4$, $b = 4$ y $c = 2$ están alineados al sistema de coordenadas cartesiano x , y y z respectivamente. | 20 |
| 2.4. Esferoide prolata centrada en el origen cuyos semiejes $a = 4$, $b = 2$ y $c = 2$ están alineados al sistema de coordenadas cartesiano x , y y z respectivamente. | 21 |
| 2.5. Valor de L_1 para una esferoide oblata y prolata en términos de su excentricidad e | 22 |
| 3.1. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas de plata de diferentes tamaños. | 24 |
| 3.2. Configuración para determinar la longitud de onda que excita el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas. El campo eléctrico incidente se propaga a lo largo del eje z y está polarizado linealmente a lo largo del eje x | 25 |
| 3.3. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 10 \text{ nm}$ | 25 |
| 3.4. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 20 \text{ nm}$ | 26 |
| 3.5. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 30 \text{ nm}$ | 26 |
| 3.6. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 40 \text{ nm}$ | 26 |
| 3.7. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 60 \text{ nm}$ | 27 |
| 3.8. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 70 \text{ nm}$ | 27 |
| 3.9. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 80 \text{ nm}$ | 27 |
| 3.10. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 85 \text{ nm}$ | 28 |
| 3.11. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 10 \text{ nm}$ | 31 |

| | |
|---|----|
| 3.12. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 20 \text{ nm}$ | 31 |
| 3.13. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 30 \text{ nm}$ | 32 |
| 3.14. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 40 \text{ nm}$ | 32 |
| 3.15. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 60 \text{ nm}$ | 32 |
| 3.16. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 70 \text{ nm}$ | 33 |
| 3.17. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 80 \text{ nm}$ | 33 |
| 3.18. Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 85 \text{ nm}$ | 33 |
| 3.19. Esferoide oblato iluminado por un campo eléctrico \mathbf{E}_0 que se encuentra polarizado linealmente en el eje x' , con su vector de onda \mathbf{K}'_0 paralelo al eje z' | 36 |
| 3.20. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 25$ respecto al eje x | 37 |
| 3.21. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 45$ respecto al eje x | 37 |
| 3.22. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 65$ respecto al eje x | 37 |
| 3.23. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 85$ respecto al eje x | 38 |
| 3.24. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 85$ respecto al eje x | 38 |
| 3.25. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 65$ respecto al eje x | 38 |
| 3.26. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 45$ respecto al eje x | 39 |
| 3.27. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 25$ respecto al eje x | 39 |
| 3.28. Esferoide prolata iluminada por un campo eléctrico \mathbf{E}_0 que se encuentra polarizado linealmente en el eje x' , con su vector de onda \mathbf{K}'_0 paralelo al eje z' | 41 |
| 3.29. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 25$ respecto al eje x | 41 |
| 3.30. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 45$ respecto al eje x | 42 |
| 3.31. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 65$ respecto al eje x | 42 |

| | |
|---|----|
| 3.32. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 85$ respecto al eje x | 42 |
| 3.33. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 85$ respecto al eje x | 43 |
| 3.34. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 65$ respecto al eje x | 43 |
| 3.35. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 45$ respecto al eje x | 43 |
| 3.36. Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 25$ respecto al eje x | 44 |

Resumen

Éste trabajo de tesis presenta un estudio teórico de la generación de plasmones localizados de superficie en nanopartículas elipsoidales de oro y plata en el régimen cuasiestático, esto es, la longitud de onda λ del campo eléctrico incidente es mayor que cualquiera de los semiejes del elipsoide. En el presente se pone énfasis en el estudio de nanopartículas oblatas y prolatas que admiten soluciones analíticas del potencial eléctrico y por tanto de la polarizabilidad exhibida por la partícula debido a la presencia de un campo eléctrico externo. Así mismo, se muestran resultados sobre la generación de dichos plasmones a diferentes tamaños de nanopartículas esféricas empleando la función dieléctrica del modelo de Drude determinando las frecuencias a las que la polarizabilidad alcanza un valor máximo. En el desarrollo de éste trabajo se estudian las diferencias que exhibe el coeficiente de esparcimiento cuando las nanopartículas tienen diversas orientaciones respecto al campo eléctrico incidente que está conformado por una onda plana monocromática, así como las diferencias que se tienen cuando se emplean los resultados experimentales reportados en la literatura que describen la función dieléctrica del metal.

Introducción

El crecimiento acelerado de temas científicos y tecnológicos en el siglo XXI tiene como uno de sus principales objetivos el estudio, diseño y construcción de componentes de un orden de escala nanométrica, empleados principalmente en ramas de conocimiento científico como la física, medicina e ingeniería. Un campo de investigación impulsado por este desarrollo es la nanofotónica y de manera particular, la plasmónica, que tiene como objetivo principal el estudio de la interacción entre campos electromagnéticos y los electrones libres en interfaces metal-dieléctrico. La caracterización de las propiedades ópticas de nanometales cuando son iluminados por diferentes longitudes de onda y bajo determinadas configuraciones se ha vuelto de gran interés debido a la absorción, esparcimiento, reflexión y difracción que presentan.

El artículo publicado por R. Wood en 1902 [1] donde presenta anomalías en el espectro de difracción de una rejilla metálica iluminada por una fuente de luz blanca llamó la atención de la comunidad científica dedicada a la óptica, ya que dicho espectro presentaba líneas bien definidas de mayor intensidad en comparación con el resto de colores, así como la aparición de bandas oscuras cuando el ángulo de incidencia de la luz era de unos pocos minutos de arco respecto a la normal de la rejilla. Dichos fenómenos no pudieron ser explicados teóricamente por el autor ni por la comunidad científica con la teoría existente hasta el año de 1907, cuando Lord Rayleigh publica su artículo "*On the Dynamical Theory of Gratings*"[2] donde desarrolla la teoría necesaria para explicar fenómenos de difracción en rejillas empleando series de Fourier y condiciones de frontera. En el mismo se encuentra una explicación detallada de los fenómenos reportados en el artículo de Wood. En 1935 Wood presenta una segunda parte de su artículo de 1902 [3] donde realiza una experimentación más detallada haciendo incidir luz polarizada de diferentes formas respecto al vector normal de la rejilla. Tras revisar sus resultados observó que el ángulo del plano de polarización respecto a la orientación de la rejilla cambió de posición las franjas brillantes y las bandas oscuras respecto a su longitud de onda, algo similar ocurría tras emplear diferentes dieléctricos entre la rejilla para incidir la luz. Sus trabajos muestran que la llave para el entendimiento de las particularidades observadas está en la polarización.

En 1941 Ugo Fano Publica un artículo titulado "*The Theory of Anomalous Diffraction Gratings and of Quasi-Stationary Waves on Metallic Surfaces (Sommerfeld's Waves)*"[4] donde analiza teóricamente la intensidad de las ondas difractadas por una rejilla de difracción metálica bajo la condición de que la onda primaria es monocromática y plana, en este se encuentran las causas por las que los resultados pueden cambiar, tal como la longitud de onda de la luz incidente, el ángulo de incidencia respecto a la rejilla, el ángulo de emergencia de las ondas difractadas, la geometría de la rejilla (el perfil de los surcos y sus dimensiones), las propiedades ópticas de la rejilla y del medio por el que se propaga la luz, y la polarización que tenga la luz incidente. En este artículo se llega a la conclusión de que las anomalías descritas en los artículos de Wood [1], [3] surgen cuando el vector magnético es paralelo a la superficie de la rejilla (Modo transversal magnético).

Años posteriores, el trabajo de Ritchie [5], en el que estudia las pérdidas de energía que sufren los electrones al pasar por películas metálicas delgadas, determina la probabilidad de absorción de energía por unidad de longitud en función de una frecuencia de excitación empleando mecánica cuántica, con esto, presenta un avance en el entendimiento de estos fenómenos y de la plasmónica en general, ya que en el mismo reporta la opinión y resultados de diversos autores sobre las causas

que pueden originar las pérdidas, una de esas opiniones es de Pines y Bohm, que en sus trabajos sobre la interacción de conjuntos de electrones con campos electromagnéticos [6] sugieren que la pérdida se debe a la excitación de oscilaciones de plasma denominadas como plasmones, esto es, a excitaciones electromagnéticas que se propagan a lo largo de una interfaz metal- dieléctrico, con la característica de estar confinada de manera evanescente en la dirección perpendicular respecto a su dirección de propagación, en su trabajo presentan la relación de dispersión para los plasmones. La expresión encontrada se comprobó mediante los datos experimentales presentados por Watanabe's en 1956 [7] .

Los trabajos descritos anteriormente sentaron las bases de la plasmónica y el interés de la comunidad científica por estudiar los fenómenos de este campo. Es por esto, que en 1968 se publican dos trabajos de gran interés para la generación de plasmones polaritones de superficie, cuyo nombre describe su capacidad de propagarse a través de la superficie del metal. El primero de estos dos trabajos se publica por Otto [8], en el que presenta la relación de dispersión que acopla la oscilación del plasma de electrones libres del metal con el campo eléctrico incidente de manera coherente y se genera el plasmón de superficie. En el mismo presenta una configuración para generar el plasmón experimentalmente, denominado como "*Método de reflexión total frustrada*". En el trabajo de Kretschmann y Raether se presenta una alternativa para generar plasmones de superficie de manera experimental, conocida de manera general como la configuración de Kretschmann [9].

A partir de los trabajos experimentales de Otto [8] y Kretschmann [9] se comienza a estudiar la naturaleza de los modos que existen en una única interfaz y en sistemas de dos o más interfaces, así como diversos métodos para generar plasmones polaritones de superficie, tales como el acoplamiento con prismas y rejillas de difracción, el uso de haces ópticos altamente enfocados, excitación a campo cercano y la generación de estos empleando elementos fotónicos, por mencionar algún ejemplo, está el trabajo de Burstein [10], en el que se presenta una explicación detallada de algunos métodos para generar plasmones.

En los años posteriores, entre 1980 y 1990, el estudio de sistemas físicos a escalas nanométricas toma interés en la comunidad científica, por tal motivo nace la nanotecnología en 1980 como un campo de investigación que ofrece nueva física para estudiar. Con el desarrollo anterior, el campo de la plasmónica comienza a estudiar y describir las propiedades ópticas que muestran los metales a escala nanométrica cuando estos son radiados por diferentes longitudes de onda y bajo diversas configuraciones. Uno de los primeros trabajos en mostrar fenómenos interesantes es el reportado por Ebbensen en 1998 [11], donde hace incidir luz a través de una película metálica de plata con un espesor de $2 \mu m$ con la característica de tener agujeros de un diámetro entre $150 nm$ y $1 \mu m$, espaciados entre sí por una distancia de 0.6 a $1.8 \mu m$, donde encuentra que en el orden cero de los espectros de transmisión cuando la longitud de onda del haz incidente es mayor que la distancia de separación entre agujeros y la longitud de onda de la misma es aproximadamente 10 veces mayor que el diámetro de estos (pasando el límite de difracción), hay picos agudos de intensidad. Dichos picos son máximos que superan la eficiencia de transmisión normalizada. El fenómeno reportado por Ebbensen es conocido hoy en día como plasmón localizado de superficie, que se define como una excitación de los electrones libres de una nanoestructura conductora que se acoplan de manera coherente a un campo electromagnético externo y no se propaga. La generación del plasmón localizado de superficie depende de factores como la geometría nanométrica del metal a iluminar, las propiedades ópticas de esta y del dieléctrico que lo rodea, la polarización del campo electromagnético incidente respecto a un sistema de referencia con el que se describe cada punto del nanometal y de la longitud de onda con la que se ilumina.

El estudio teórico de los plasmones polaritones de superficie (*SPP* por sus siglas en inglés) y los plasmones localizados de superficie (*LSP* por sus siglas en inglés) se hace mediante la aplicación de las ecuaciones de Maxwell para medios materiales, tomando en cuenta las condiciones geométricas del problema, las propiedades ópticas del metal, y utilizando las condiciones de frontera adecuadas en la interfaz que se forma entre el mismo y un elemento dieléctrico.

De manera particular, éste trabajo se centra en el estudio de la generación de plasmones localizados de superficie en nanopartículas elipsoidales de oro y plata considerando que el tamaño de

las mismas son de dimensiones inferiores en comparación a la longitud de onda con la que son iluminadas, dicha consideración es conocida como aproximación cuasiestática.

Uno de los casos más estudiados para la generación de LSPs es aquel en que la geometría de la nanopartícula metálica es una esfera con una permitividad dependiente de la frecuencia de iluminación $\epsilon = \epsilon(\omega)$ inmersa en un dieléctrico con permitividad ϵ_1 cuyo radio es mucho menor que la longitud de onda con la que se ilumina. Un caso más complejo de estudio es el de una nanopartícula con geometría elipsoidal, ya que al estudiar el potencial electromagnético producido por el acoplamiento entre las cargas libres de la nanopartícula y un campo eléctrico externo no siempre se puede encontrar una solución analítica del mismo. Para determinar las frecuencias de iluminación que generan plasmones localizados de superficie se analiza el coeficiente de esparcimiento, ya que éste determina que longitudes de onda serán mayormente esparcidas por las nanopartículas, teniendo como consecuencia una amplificación local del campo eléctrico fuera de la misma.

Objetivos

General

El objetivo general de este trabajo es estudiar casos particulares en los que se obtengan soluciones analíticas que describan el potencial eléctrico de una nanopartícula de geometría elipsoidal, con la finalidad de caracterizar las condiciones necesarias para la excitación del plasmón localizado de superficie.

Particulares

- Calcular las frecuencias de iluminación a las que se originan los plasmones localizados de superficie en nanopartículas esféricas oblatas y prolatas empleando la teoría de Drude para un gas de electrones libres dentro de la aproximación cuasiestática cuando son iluminados en uno o dos de sus semiejes distintos.
- Analizar los rangos en los que se generan los plasmones localizados de superficie en nanopartículas esféricas de oro (*Au*) y plata (*Ag*) para hacer una comparación respecto a los resultados reportados por la literatura con la finalidad de determinar los rangos del espectro electromagnético en los que se puede predecir la generación empleando el modelo de Drude para la permitividad eléctrica.

Estructura de la tesis

En el Capítulo 1 se muestra el marco teórico necesario para la descripción del problema, en él se tratan temas como la teoría electromagnética de Maxwell, el modelo de Lorentz-Drude para la conducción eléctrica, la absorción y el esparcimiento de partículas al ser iluminadas y como punto final, la introducción a los plasmones localizados de superficie. El capítulo 2 se centra en el desarrollo teórico de la generación de *LSP* para nanopartículas con geometría elipsoidal, en el mismo se presentan las condiciones necesarias para encontrar soluciones analíticas para su excitación, como es el caso para nanopartículas oblatas y prolatas cuando son iluminadas por un campo electromagnético linealmente polarizado a alguno de sus semiejes. En el capítulo 3 se muestran las frecuencias de iluminación para generar los plasmones localizados de superficie en nanopartículas oblatas y prolatas variando su tamaño, composición y configuración respecto al campo eléctrico incidente. Finalmente, el Capítulo 4 muestra las conclusiones que se obtuvieron de los resultados mostrados en el capítulo 3 en comparación a los resultados reportados en la literatura y se presenta un panorama general de la investigación a futuro que se puede hacer con el presente trabajo de tesis.

Capítulo 1

Marco Teórico

1.1. Electrodinámica

La electrodinámica es la rama de la física encargada de estudiar la interacción entre campos eléctricos y magnéticos tomando en cuenta la presencia de cargas en movimiento. Temas como fuerza electromotriz, inducción electromagnética y energía electromagnética son tratados por este campo de estudio. Científicos como Michael Faraday, André-Marie Ampère, Hendrik Antoon Lorentz y Carl Friedrich Gauss sentaron las bases de la electrodinámica a lo largo del siglo XVIII mediante la formulación de leyes empíricas. En 1873 el físico escocés James Clerk Maxwell juntó los conceptos y leyes de los campos eléctricos y magnéticos para unificarlos en un concepto conocido como campo electromagnético plasmado en su obra literaria *Tratado de electricidad y magnetismo*.

1.1.1. Ecuaciones de Maxwell

Las ecuaciones de Maxwell para medios materiales son 4 expresiones algebraicas que relacionan cuatro campos macroscópicos [12], \mathbf{E} (eléctrico), \mathbf{D} (desplazamiento eléctrico), \mathbf{H} (magnético) y \mathbf{B} (inducción magnética). Su forma diferencial es la siguiente:

$$\text{Ley de Gauss} \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{ext} \quad (1.1)$$

$$\text{Ley de Gauss magnética} \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.2)$$

$$\text{Ley de Faraday} \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\text{Ley de Ampère} \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_{ext} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.4)$$

Donde ρ_{ext} y \mathbf{J}_{ext} son la carga y densidad de corriente externas. Los cuatro campos macroscópicos están relacionados por la polarización \mathbf{P} y la magnetización \mathbf{M} .

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}; \quad \mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M}. \quad (1.5)$$

Empleando la ley de conservación de las cargas y la densidad de carga interna, la ecuación que relacionan la densidad de corriente y la carga interna es:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}. \quad (1.6)$$

Tratándose de medios no magnéticos el término correspondiente a la magnetización no aparece en la ley de Ampère. Para medios isótropos y no magnéticos las relaciones constitutivas se definen de

la siguiente forma:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}; \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mu \mathbf{H}. \quad (1.7)$$

La relación constitutiva entre el campo eléctrico y la densidad de corriente se define como:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (1.8)$$

donde σ representa la conductividad eléctrica.

La respuesta de materiales a estímulos ópticos depende de la frecuencia y del vector de onda \mathbf{K} con el que se ilumine. Mediante el análisis de Fourier se puede descomponer el campo óptico en una suma de ondas planas, de ese modo, el desplazamiento eléctrico y la densidad de corriente se pueden representar en el dominio de Fourier.

$$\mathbf{D}(\mathbf{K}, \omega) = \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{K}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{K}, \omega), \quad (1.9)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{K}, \omega) = \sigma(\mathbf{K}, \omega) \mathbf{E}. \quad (1.10)$$

Empleando las ecuaciones (1.5), (1.6), (1.9) y (1.10) se obtiene la expresión que relaciona la permitividad con la conductividad, llamada *función dieléctrica* [13].

$$\epsilon(\mathbf{K}, \omega) = 1 + \frac{i\sigma(\mathbf{K}, \omega)}{\epsilon_0 \omega}. \quad (1.11)$$

1.1.2. Relación de dispersión

La relación de dispersión es la ecuación que relaciona el vector de onda de una onda, \mathbf{K} , con su frecuencia ω .

Al desacoplar la ec. (1.3) con la ec. (1.4) se obtiene la *ecuación de onda*, que describe la propagación de ondas electromagnéticas:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2}. \quad (1.12)$$

En el dominio de Fourier los operadores ∇ y $\frac{\partial}{\partial t}$ pasan a ser \mathbf{K} y $-i\omega$ respectivamente:

$$\mathbf{K}(\mathbf{K} \cdot \mathbf{E}) - k^2 \mathbf{E} = -\epsilon(\mathbf{K}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}. \quad (1.13)$$

Para ondas transversales, $\mathbf{K} \cdot \mathbf{E} = 0$, por tanto, la relación de dispersión es:

$$k^2 = \epsilon(\mathbf{K}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (1.14)$$

Para ondas longitudinales $\mathbf{K} \cdot \mathbf{E} \neq 0$, y la relación de dispersión es:

$$\epsilon(\mathbf{K}, \omega) = 0. \quad (1.15)$$

La ecuación (1.15) permite oscilaciones colectivas longitudinales. La función dieléctrica es una cantidad física que explica como se comporta un material cuando interacciona con radiación electromagnética, la expresión anterior no implica que la permitividad del material tenga un valor de cero para todos los casos, sin embargo, a una determinada frecuencia ω , la radiación electromagnética se propaga a través del mismo entrando en resonancia con los electrones libres de dicho material.

1.2. Función dieléctrica para un gas de electrones libre.

La función dieléctrica de los metales se puede explicar tomando en cuenta el modelo de un gas de electrones libres cuya densidad se denota por n , dicho gas se mueven en un fondo de iones de núcleo positivo en respuesta a un estímulo externo \mathbf{E} , este modelo se conoce como *plasma de electrones* o modelo de *Drude* [13]. Para los electrones bajo la presencia de un campo eléctrico externo \mathbf{E} y considerando amortiguamiento debido a la colisión entre ellos denotado por $\gamma = \frac{1}{\tau}$, donde τ es el tiempo de relajación del gas de electrones, la ecuación de movimiento para un electrón es:

$$m\ddot{\mathbf{x}} + m\tau\dot{\mathbf{x}} = -e\mathbf{E}, \quad (1.16)$$

donde m y e son la masa y carga del electrón, respectivamente. La solución a la ecuación diferencial se obtiene empleando funciones armónicas en el tiempo para \mathbf{E} y \mathbf{x} . Así, la solución a la ecuación diferencial tiene la siguiente forma:

$$\mathbf{x} = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)}\mathbf{E}, \quad (1.17)$$

donde ω es la frecuencia de oscilación del electrón.

Los electrones desplazados contribuyen a la polarización del material mediante la relación $\mathbf{P} = -ne\mathbf{x}$, con lo que:

$$\mathbf{P} = -\frac{ne^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)}\mathbf{E}. \quad (1.18)$$

Combinando la ecuación (1.18) con la ecuación (1.5) que describe el desplazamiento eléctrico se obtiene una expresión que describe el desplazamiento eléctrico en términos de la frecuencia de oscilación ω .

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right) \mathbf{E}, \quad (1.19)$$

donde $\omega_p = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}$ representa la frecuencia de plasma del gas de electrones libres. La función dieléctrica para el plasma de electrones tiene la siguiente forma:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \quad (1.20)$$

La permitividad eléctrica del plasma es una función compleja, por lo que se puede representar como $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ donde la componente real e imaginaria tienen las siguientes expresiones:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2\tau^2}{1 + \omega^2\tau^2} \quad (1.21)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\omega_p^2\tau}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)} \quad (1.22)$$

Para frecuencias $\omega < \omega_p$ el modelo de Drude predice con más exactitud la respuesta óptica de los metales en comparación a cuando la desigualdad se invierte, rango en el que toman lugar fenómenos cuánticos que no considera este modelo.

Si se considera que la frecuencia ω es muy cercana a ω_p entonces $\omega\tau \gg 1$ y la parte real de la función dieléctrica es predominante. Así $\epsilon(\omega)$ es:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (1.23)$$

La ecuación (1.23) es la función dieléctrica para un electrón que no sufre amortiguamiento por colisiones [14]. En metales nobles como el oro y la plata es necesario tomar en cuentas las transiciones

interbanda cuando la frecuencia de iluminación está cerca o es mayor que la frecuencia del plasma, una forma de tomar en cuenta dichas transiciones es agregar un valor ϵ_∞ a la ecuación (1.20). La siguiente expresión toma en cuenta dichas transiciones.

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega - i\gamma)} \quad (1.24)$$

1.3. Índice de refracción complejo

El índice de refracción de un medio isótropo es un número complejo que depende de la frecuencia con la que se ilumine, así, éste se puede escribir como $\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$ y se define por $\tilde{n} = \sqrt{\epsilon}$, de modo que la parte real e imaginaria de la función dieléctrica en términos del índice de refracción complejo es:

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2, \quad (1.25)$$

$$\epsilon_2 = 2n\kappa. \quad (1.26)$$

Combinando la ecuación (1.25) con la ecuación (1.26) se obtienen los valores de la parte real e imaginaria del índice de refracción complejo [13]:

$$n^2 = \frac{\epsilon_1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}, \quad (1.27)$$

$$\kappa = \frac{\epsilon_2}{2\sqrt{\frac{\epsilon_1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}}}. \quad (1.28)$$

La parte imaginaria κ del índice de refracción determina la cantidad de luz absorbida en un medio por el cuál se propaga la luz.

1.4. Absorción y esparcimiento por partículas arbitrarias

Cuando una partícula arbitraria es iluminada por un haz de luz, la cantidad de ésta que es absorbida y esparcida depende de la naturaleza de la partícula, como su forma, tamaño y el material de la misma, así como de la polarización, longitud de onda, frecuencia espacial y el ángulo de incidencia de la luz.

Se analiza una partícula arbitraria cuyas propiedades ópticas son bien conocidas que es iluminada por una onda monocromática arbitrariamente polarizada. La cantidad de luz absorbida y esparcida por la partícula se obtiene conociendo el campo eléctrico y magnético en toda la región del espacio. La partícula se encuentra inmersa en un dieléctrico cuya permitividad es ϵ_m . El campo incidente es $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$, el campo dentro de la partícula es $(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)$, $(\mathbf{E}_2, \mathbf{H}_2)$ es el campo total evaluado en un punto fuera de la partícula y $(\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)$ es el campo esparcido por la misma. Los campos eléctricos y magnéticos dependen de la posición \mathbf{r} donde se quieran medir y de la frecuencia de iluminación ω , además, fuera de la partícula, el campo total es igual a la suma del campo esparcido por la partícula con el campo electromagnético incidente [15]:

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_s(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{E}_i(\mathbf{r}, \omega), \quad (1.29)$$

$$\mathbf{H}_2(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{H}_s(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{H}_i(\mathbf{r}, \omega). \quad (1.30)$$

Los campos eléctricos y magnéticos satisfacen las ecuaciones de Maxwell para todos los puntos donde μ y ϵ son continuos, esto es, para el medio dieléctrico y dentro de la partícula se cumplen, mientras que en la interface entre estos dos medios las condiciones de frontera requieren que las componentes tangenciales se conserven [16]:

$$[\mathbf{E}_2(\mathbf{r}_b, \omega) - \mathbf{E}_1(\mathbf{r}_b, \omega)] \times \mathbf{n} = 0, \quad (1.31)$$

$$[\mathbf{H}_2(\mathbf{r}_b, \omega) - \mathbf{H}_1(\mathbf{r}_b, \omega)] \times \mathbf{n} = 0, \quad (1.32)$$

donde \mathbf{r}_b es un vector de posición y \mathbf{n} un vector normal en la frontera de la partícula donde se quiere conocer el campo electromagnético.

Considérese una partícula iluminada por una onda plana monocromática cuya dirección de propagación es \hat{z} que presenta esparcimiento en la dirección \hat{e}_r , ambas componentes vectoriales forman un plano, llamado *Plano de esparcimiento*. Tal como se muestra en la Figura 1.1.

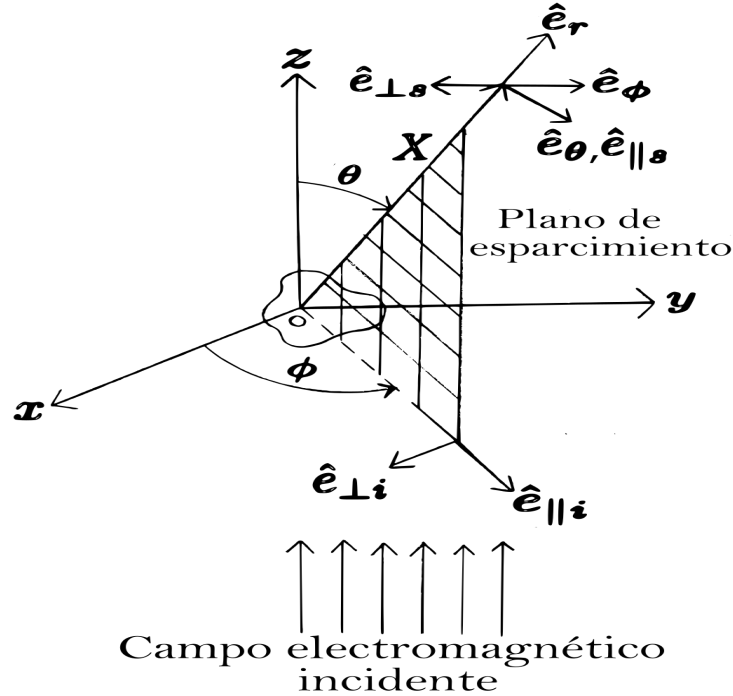


Figura 1.1: Sistema de coordenadas empleado para la descripción del esparcimiento de luz por una partícula arbitraria.

El *Plano de esparcimiento* está definido por el ángulo azimutal, excepto cuando \hat{e}_r y \hat{z} son paralelos. Utilizando el sistema de coordenadas polar esférico se obtienen relaciones entre la base de éste y la base del *Plano de esparcimiento*.

$$\hat{e}_{\parallel s} = \hat{e}_\theta; \quad \hat{e}_{\perp s} = -\hat{e}_\phi; \quad \hat{e}_{\perp s} \times \hat{e}_{\parallel s} = \hat{e}_r. \quad (1.33)$$

A distancias suficientemente alejadas del origen, donde se cumple la condición $kr \gg 1$ (campo lejano), el campo eléctrico \mathbf{E}_s es aproximadamente transversal [12] ($\hat{e}_r \cdot \mathbf{E}_s \approx 0$) y adquiere la siguiente expresión:

$$\mathbf{E}_s \approx \frac{e^{ikr}}{-ikr} \mathbf{A}; \quad kr \gg 1. \quad (1.34)$$

El vector \mathbf{A} de la ecuación (1.34) es conocido como el vector potencial, para ver un tratamiento más detallado sobre dicho vector véase [12]. La matriz de esparcimiento que describe el campo esparcido por la partícula \mathbf{E}_s en términos de \mathbf{E}_i es:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\parallel s} \\ \mathbf{E}_{\perp s} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} s_2 & s_3 \\ s_4 & s_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\parallel i} \\ \mathbf{E}_{\perp i} \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

Donde cada s_j con $j = 1, 2, 3, 4$ depende del ángulo de esparcimiento θ y del ángulo azimutal ϕ . La cantidad de luz esparcida y absorbida por la partícula se obtiene calculando el vector de Poynting, que especifica la magnitud y dirección de la velocidad de transferencia de energía electromagnética en el espacio por el que se propaga la luz [15]. El vector de Poynting se puede ver como una suma en la que contribuyen el campo externo, el esparcimiento de luz de la partícula que se debe a la presencia del campo externo y la interacción entre estos dos campos, así, $\mathbf{S} = \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_s + \mathbf{S}_{ext}$ donde \mathbf{S}_i es el vector de Poynting del haz incidente, \mathbf{S}_s es el vector de Poynting de la luz esparcida por la partícula y \mathbf{S}_{ext} es el vector de Poynting que toma en cuenta la interacción entre los campos $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$ y $(\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)$. Sus relaciones explícitas son:

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} Re [\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_i^*]; \quad \mathbf{S}_s = \frac{1}{2} Re [\mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s^*], \quad (1.36)$$

$$\mathbf{S}_{ext} = \frac{1}{2} Re [\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_s^* + \mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_i^*], \quad (1.37)$$

donde cada asterisco colocado en los campos indican el complejo conjugado del mismo. Para estudiar el problema de esparcimiento es importante tomar en cuenta la polarización de la luz incidente. Por ello en las siguientes dos subsecciones se tratará la teoría necesaria para determinar la cantidad de luz esparcida y absorbida.

1.4.1. Parámetros de Stokes

Los parámetros de Stokes describen la polarización de la luz en diversos fenómenos ópticos. La teoría parte de la representación de una onda de luz monocromática como la suma de dos ondas ortogonales entre si. Son 4 experimentos con los que se describen los parámetros. Las Figuras 1.2 a 1.4 muestran las configuraciones de los experimentos 2, 3 y 4.

Experimento 1: Se determina la irradiancia I de un haz de luz polarizado linealmente sobre un plano sin colocar algún polarizador entre el detector (fotómetro) y el haz. Se define el primer parámetro de Stokes como la irradiancia I .

$$I = E_{\parallel} E_{\parallel}^* + E_{\perp} E_{\perp}^*. \quad (1.38)$$

Experimento 2: Se coloca un polarizador alineado a alguna de las dos componentes que describen el plano de polarización de un campo eléctrico incidente polarizado linealmente. La irradiancia de un polarizador alineado al eje x es $I_{\parallel} = E_{\parallel} E_{\parallel}^*$, para un polarizador alineado al eje y es $I_{\perp} = E_{\perp} E_{\perp}^*$. Se define el segundo parámetro de Stokes de la siguiente manera:

$$Q = I_{\parallel} - I_{\perp} = E_{\parallel} E_{\parallel}^* - E_{\perp} E_{\perp}^*. \quad (1.39)$$

Experimento 3: Se coloca un polarizador lineal a $+45^\circ$ o -45° respecto a una base que describe las componentes ortogonales de un campo eléctrico linealmente polarizado sobre un plano descrito por $(\hat{e}_{\parallel}, \hat{e}_{\perp})$. Para hacer el cálculo de la irradiancia se cambia a una base para describir el campo que tenga una rotación de $\pm 45^\circ$ respecto a su base original, descrita por la siguiente ecuación:

$$\mathbf{E}_0 = E_+ \hat{e}_+ + E_- \hat{e}_-, \quad (1.40)$$

donde $E_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{\parallel} + E_{\perp})$ y $E_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{\parallel} - E_{\perp})$.

Cuando el polarizador esté a $+45^\circ$ la irradiancia captada por el detector será:

$$I_+ = \frac{E_{\parallel} E_{\parallel}^* + E_{\perp} E_{\perp}^* + E_{\parallel} E_{\perp}^* + E_{\perp} E_{\parallel}^*}{2}. \quad (1.41)$$

Cuando el polarizador esté a -45° la irradiancia captada por el detector será:

$$I_- = \frac{E_{\parallel} E_{\parallel}^* + E_{\perp} E_{\perp}^* - E_{\parallel} E_{\perp}^* - E_{\perp} E_{\parallel}^*}{2}. \quad (1.42)$$

La resta entre los dos casos define el tercer parámetro de Stokes:

$$U = I_+ - I_- = E_{\parallel}E_{\perp}^* + E_{\perp}E_{\parallel}^*. \quad (1.43)$$

Experimento 4: Se coloca un polarizador circular entre un campo eléctrico polarizado linealmente sobre un plano y un detector. La irradiancia se calcula mediante un nuevo sistema de coordenadas definido por las siguientes expresiones:

$$\hat{e}_R = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_{\parallel} + i\hat{e}_{\perp}); \quad \hat{e}_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_{\parallel} - i\hat{e}_{\perp}). \quad (1.44)$$

Con el cambio de vectores unitarios el campo eléctrico es $\mathbf{E}_0 = E_R\hat{e}_R + E_L\hat{e}_L$ con los valores de sus componentes descritos de la siguiente manera:

$$E_R = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{\parallel} - iE_{\perp}); \quad E_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{\parallel} + iE_{\perp}). \quad (1.45)$$

Así, la irradiancia para una polarización circular derecha será:

$$I_R = \frac{E_{\parallel}E_{\parallel}^* + E_{\perp}E_{\perp}^* + iE_{\parallel}E_{\perp}^* - iE_{\perp}E_{\parallel}^*}{2}. \quad (1.46)$$

La irradiancia captada por el detector con polarización circular izquierda es:

$$I_L = \frac{E_{\parallel}E_{\parallel}^* + E_{\perp}E_{\perp}^* - iE_{\parallel}E_{\perp}^* + iE_{\perp}E_{\parallel}^*}{2}. \quad (1.47)$$

La resta entre I_R e I_L es el cuarto parámetro de Stokes.

$$V = I_R - I_L = i(E_{\parallel}E_{\perp}^* - E_{\perp}^*E_{\parallel}). \quad (1.48)$$

Los cuatro experimentos anteriores forman los parámetros de Stokes I , Q , U y V .

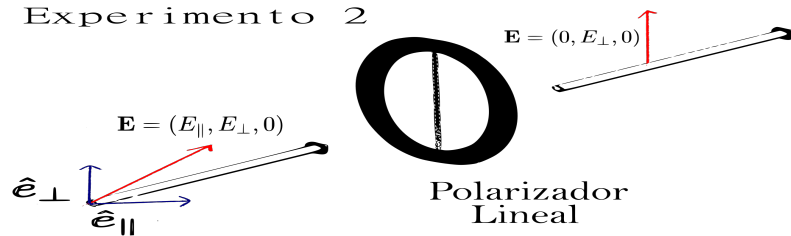


Figura 1.2: Configuración para determinar el segundo parámetro de Stokes.

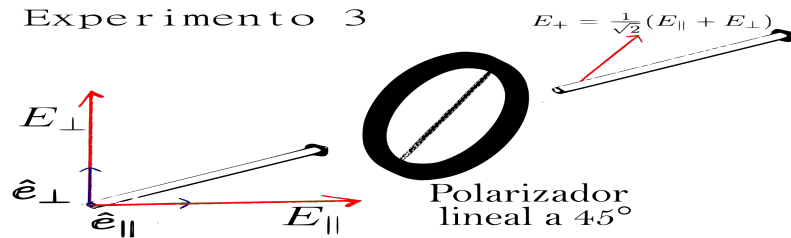


Figura 1.3: Configuración para determinar el tercer parámetro de Stokes.

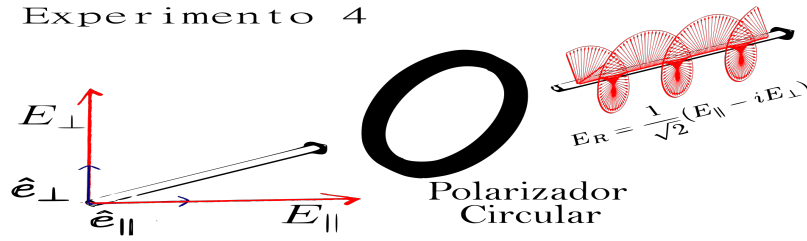


Figura 1.4: Configuración para determinar el cuarto parámetro de Stockes.

1.4.2. Matrices de Müller

Las matrices de Müller son una relación entre un haz incidente de luz y la porción de esta que se transmite cuando interactúa con un elemento óptico empleando los parámetros o vectores de Stockes. Estas matrices tratan de manera general un polarizador lineal ideal, un retardador ideal, o un polarizador arbitrario. Es una herramienta matemática para tratar la irradiancia que se obtiene cuando hay elementos ópticos empleados en los experimentos.

1.4.3. Extinción, esparcimiento y absorción

Una partícula inmersa en un medio no absorbente es iluminada por una onda plana. La razón a la cuál la energía electromagnética W_a cruza una superficie A que corresponde a una esfera imaginaria de radio R es:

$$W_a = - \int_A \mathbf{S} \cdot \hat{e}_r dA. \quad (1.49)$$

Si $W_a > 0$, entonces la energía es absorbida dentro de la esfera, debido a que el medio es no absorbente, implica que $W_a < 0$ es la cantidad de energía creada por la esfera. Las ecuaciones (1.36) y (1.37) se emplean para calcular W_a en términos de los vectores de Poynting \mathbf{S}_i , \mathbf{S}_s y \mathbf{S}_{ext} [15].

$$W_a = W_i - W_s + W_{ext}, \quad (1.50)$$

donde cada término de la ecuación (1.50) corresponde a una integral de superficie sobre la esfera:

$$W_i = \int_A \mathbf{S}_i \cdot \hat{e}_r dA; \quad W_s = \int_A \mathbf{S}_s \cdot \hat{e}_r dA; \quad W_{ext} = \int_A \mathbf{S}_{ext} \cdot \hat{e}_r dA. \quad (1.51)$$

La restricción de que el medio en el que está inmersa la partícula sea no absorbente implica que W_i sea cero. El tamaño del radio de la esfera imaginaria debe cumplir únicamente con la condición de tener contenida a la partícula, por lo que se puede tomar el radio R de tal manera que se analice el problema en campo lejano, es decir, cuando r tiende a infinito. Por tanto, si un campo polarizado en la dirección \hat{e}_x se aplica, el campo electromagnético esparcido por la partícula puede escribirse de la siguiente manera [16]:

$$\mathbf{E}_s \approx \frac{e^{ik(r-x)}}{-ikr} \mathbf{X} E; \quad \mathbf{H}_s \approx \frac{k}{\omega\mu} \hat{e}_r \times \mathbf{E}_s, \quad (1.52)$$

donde $\hat{e}_r \cdot \mathbf{X} = 0$ y \mathbf{X} es el vector de amplitud de esparcimiento, que se relaciona con los elementos S_j de la matriz de amplitud de esparcimiento como:

$$\mathbf{X} = (S_2 \cos(\phi) + S_3 \sin(\phi)) + (S_4 \cos(\phi) + S_1 \sin(\phi)). \quad (1.53)$$

Empleando la ecuación (1.52) en la ecuación (1.51) para W_{ext} y tomando en cuenta que $kr \rightarrow \infty$ cuando $r \rightarrow \infty$, se obtiene la siguiente expresión:

$$W_{ext} = I_i \frac{4\pi}{K^2} Re [\mathbf{X} \cdot \hat{e}_x]_{\theta=0}, \quad (1.54)$$

donde I_i es la irradiancia incidente. Para un tratamiento más detallado véase [15]. El coeficiente de extinción se define como $C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_i}$, que de manera explícita tiene la siguiente forma:

$$C_{ext} = \frac{4\pi}{K^2} Re [\mathbf{X} \cdot \hat{e}_x]_{\theta=0}, \quad (1.55)$$

Empleando la ecuación (1.50) se obtiene una ecuación que describe los coeficientes C_{abs} (coeficiente de absorción), C_s (coeficiente de esparcimiento) y C_{ext} (coeficiente de extinción):

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca}. \quad (1.56)$$

El coeficiente C_{ext} es llamado sección transversal de extinción y representa físicamente el área efectiva de la partícula que interacciona con la luz. Dicho coeficiente se relaciona con la sección transversal de absorción C_{abs} y esparcimiento C_{sca} , así, C_{ext} estima la pérdida de energía electromagnética después de que esta interacciona con el material, por tal motivo se relaciona con la cantidad de luz absorbida y esparcida por la partícula.

De manera general, la cantidad de luz que es absorbida por la partícula se estima conociendo la potencia de incidencia y la potencia cuando la luz pasa a través de la partícula, con la condición de medir la potencia de salida de manera paralela a la dirección de propagación del campo eléctrico.

1.5. Plasmones localizados de superficie

El plasmón localizado de superficie se define como una excitación que no se propaga de los electrones libres de un metal nanoestructurado inmerso en un dieléctrico y que se acopla de manera coherente a un campo electromagnético externo aplicado. La superficie curva de las partículas nanométricas provee una fuerza restauradora sobre los electrones de conducción que se mueven por la presencia de radiación electromagnética externa, eso hace que pueda ocurrir resonancia, y por consecuencia, una amplificación del campo electromagnético dentro y fuera de la partícula [18]. Dicha resonancia es conocida como *Plasmón localizado de superficie*.

Generar el plasmón localizado de superficie depende de la composición química de la nanopartícula, su forma, el dieléctrico en el que está inmersa, las dimensiones que tenga la misma respecto a la longitud de onda con la que se ilumina y de las propiedades ópticas de la luz incidente respecto a la nanopartícula, como su polarización y propagación respecto a un sistema de coordenadas, así como de la frecuencia de radiación [17].

1.5.1. Aproximación cuasiestática

Cuando se analizan los efectos de un campo electromagnético aplicado sobre una partícula cuyo volumen es mucho más pequeño que la longitud de onda con la que es radiada, se puede suponer que el campo es constante sobre toda la partícula. Tal suposición bajo las condiciones de tamaño antes mencionadas es llamada aproximación cuasiestática. Para analizar la generación de plasmones de superficie localizados en nanopartículas esféricas y elipsoidales es utilizada la aproximación cuasiestática, ya que permite realizar algunos cálculos de manera sencilla. La siguiente Figura representa una configuración que describe la aproximación cuasiestática.

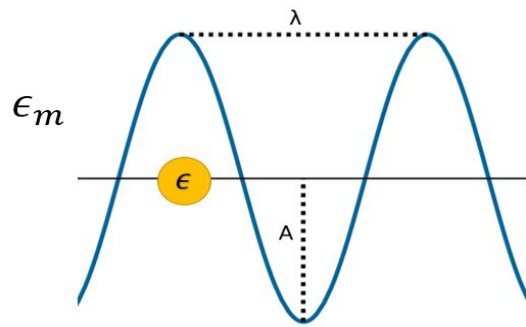


Figura 1.5: Nanopartícula con permitividad ϵ inmersa en un dieléctrico ϵ_m iluminada por una onda monocromática de longitud de onda λ .

Capítulo 2

Generación de LSP en nanopartículas metálicas elipsoidales

2.1. Plasmones de superficie localizados en una nanopartícula esférica

Para este apartado se analiza una nanopartícula esférica isótropa de permitividad dieléctrica $\epsilon(\omega)$ de radio a cuyo centro está en el origen del sistema de coordenadas cartesianas en presencia de un campo electromagnético de la forma $\mathbf{E} = E_0 \hat{z}$ que se encuentra inmersa en un dieléctrico isótropo no absorbente cuya permitividad dieléctrica es ϵ_m . Se calcula el campo eléctrico dentro y fuera de la esfera para encontrar las condiciones necesarias en las que se genera el plasmón localizado de superficie, por ello, se resuelve la ecuación de Laplace utilizando coordenadas polares esféricas. El potencial eléctrico Φ depende solamente del radio r y el ángulo θ , pero no del ángulo azimutal ϕ , así:

$$\Phi = R(r)\Theta(\theta). \quad (2.1)$$

Se emplea el operador de Laplace en coordenadas polares esféricas para la ecuación (2.1), llegándose a dos ecuaciones en θ y r independientes:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R \right) = c; \quad \frac{1}{\Theta \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \Theta \right) = -c, \quad (2.2)$$

la constante c en ambas ecuaciones diferenciales acopla el resultado de ambas. Desarrollando la ecuación que involucra a r y usando el método de Frobenius [19] para resolverla, se encuentra que $c = l(l+1)$ donde $l \in \mathbb{N}$, de modo que se obtiene una expresión para el potencial eléctrico de la siguiente manera:

$$\Phi = A\Theta r^l + B\Theta r^{-(l+1)}. \quad (2.3)$$

Para la ecuación diferencial que involucra a θ se llega a una solución de la forma:

$$\Theta = \sum_{l=0}^{\infty} P_l \cos(\theta), \quad (2.4)$$

donde $P_l(\cos(\theta))$ son los *Polinomios de Legendre* de orden l . Así, la solución completa para el potencial eléctrico es:

$$\Phi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l \cos(\theta) r^l + \sum_{l=0}^{\infty} B_l P_l \cos(\theta) r^{-(l+1)}. \quad (2.5)$$

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.1. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ESFÉRICA

Las condiciones físicas que requiere el potencial eléctrico es que sea convergente en el origen. Sea ϕ_{in} el potencial dentro de la esfera, el término $r^{-(l+1)}$ que aparece en la solución general no es convergente, por lo que $B_l = 0$ para toda l . Por lo tanto:

$$\phi_{in} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos(\theta)) r^l. \quad (2.6)$$

Para el potencial eléctrico fuera de la esfera denotado por ϕ_{out} , la condición que se impone es que lejos de la esfera ($r \rightarrow \infty$), $\phi_{out} = E_0 r \cos(\theta)$, que es la aportación al potencial debido al campo eléctrico externo:

$$\phi_{out} = E_0 r \cos(\theta) + \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(\cos(\theta)) r^{-(l+1)}. \quad (2.7)$$

Las condiciones de frontera en la superficie de la esfera requieren que las componentes normales del campo eléctrico deban ser iguales, y que las componentes tangenciales del vector desplazamiento eléctrico también lo sean:

$$\frac{1}{a} \frac{\partial \phi_{in}}{\partial \theta} = \frac{1}{a} \frac{\partial \phi_{out}}{\partial \theta} \quad (r = a), \quad (2.8)$$

$$\epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \phi_{in}}{\partial r} = \epsilon_0 \epsilon_m \frac{\partial \phi_{out}}{\partial r} \quad (r = a), \quad (2.9)$$

donde ϵ_0 es la permitividad del vacío, ϵ_m la permitividad del medio en el cuál se encuentra inmersa la partícula y ϵ la permitividad de la partícula que depende de la frecuencia con la que se ilumine. La solución completa para el potencial eléctrico dentro y fuera de la partícula es:

$$\phi_{in} = -\frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} E_0 r \cos \theta; \quad \phi_{out} = -E_0 r \cos \theta + \frac{\mathbf{P} \cdot \mathbf{r}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m r^3}, \quad (2.10)$$

donde \mathbf{r} es la posición en la que se quiere medir el campo eléctrico y \mathbf{P} es el vector de polarizabilidad [13], que indica la capacidad que tiene un material para formar dipolos eléctricos y se define de la siguiente manera:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \epsilon_m \alpha \mathbf{E}_0; \quad \alpha = 4\pi a^3 \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m}. \quad (2.11)$$

La polarizabilidad \mathbf{P} debida al campo eléctrico externo \mathbf{E}_0 experimenta resonancia cuando el término $|\epsilon + 2\epsilon_m|$ de la polarizabilidad compleja α sea igual a cero. Si suponemos que hay una lenta variación en $Im[\epsilon]$, la condición para resonancia se simplifica a $Re[\epsilon] = -2\epsilon_m$, y es conocida como condición de Fröhlich [18]. Para una esfera cuya permitividad dieléctrica se modela mediante el modelo de Drude, inmersa en aire, el criterio de Fröhlich se cumple a la frecuencia $\omega_0 = \frac{\omega_p}{\sqrt{3}}$.

Con el potencial eléctrico se puede obtener el campo eléctrico en cualquier punto dentro y fuera de la partícula tomando el gradiente negativo del mismo ($\mathbf{E} = -\nabla\Phi$), llegando a los siguientes resultados:

$$\mathbf{E}_{in} = \frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \mathbf{E}_0; \quad (2.12)$$

$$\mathbf{E}_{out} = \mathbf{E}_0 + \frac{3\hat{n}(\mathbf{P} \cdot \hat{n}) - \mathbf{P}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{1}{r^3}, \quad (2.13)$$

donde \hat{n} es un vector normal a la superficie de la partícula. Las expresiones para \mathbf{E}_{in} y \mathbf{E}_{out} tienen resonancia cuando α y por consiguiente \mathbf{P} están en resonancia. Bajo la condición de un proceso cuasiestático $a \ll \lambda$, se puede considerar un dipolo ideal, lo que es válido en la aproximación y permite una variación temporal de los campos pero no una variación espacial.

Si la partícula es iluminada por una onda plana, esto es, $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}e^{-i\omega t}$ y $\mathbf{H}(t) = \mathbf{H}e^{-i\omega t}$, entonces a campo cercano, intermedio y en zonas de radiación, el campo eléctrico y magnético puede ser escrito de la siguiente manera [12]:

$$\mathbf{H} = \frac{ck^2}{4\pi} (\hat{n} \times \mathbf{P}) \frac{e^{ikr}}{r} \left(1 - \frac{1}{ikr}\right), \quad (2.14)$$

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

$$\mathbf{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \left[k^2(\hat{n} \times \mathbf{P}) \times \hat{n} \frac{e^{ikr}}{r} + [3\hat{n}(\hat{n} \cdot \mathbf{P}) - \mathbf{P}] \left(\frac{1}{r^3} - \frac{ik}{r^2} \right) e^{ikr} \right], \quad (2.15)$$

donde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ es el número de onda de la luz con la que se ilumina la partícula. Para zonas cercanas en que se cumple la condición $kr \ll 1$ el campo eléctrico y magnético adquieren la siguiente forma:

$$\mathbf{E} = \frac{3\hat{n}(\hat{n} \cdot \mathbf{P}) - \mathbf{P}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{1}{r^3}; \quad \mathbf{H} = \frac{i\omega}{4\pi} (\hat{n} \times \mathbf{P}) \frac{1}{r^2}. \quad (2.16)$$

Para el caso donde $kr \ll 1$ el campo eléctrico \mathbf{E} es predominante en magnitud en comparación con el campo magnético \mathbf{H} . Los coeficientes de esparcimiento C_{sca} y absorción C_{abs} para la partícula esférica en aproximación cuasiestática iluminada con un campo polarizado en la dirección \hat{x} se obtienen empleando las matrices de Müller y el vector de Poynting, así, los coeficientes de esparcimiento y absorción tienen la siguiente forma [15]:

$$C_{sca} = \frac{8\pi}{3} k^4 a^6 \left\| \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right\|^2; \quad (2.17)$$

$$C_{abs} = 4\pi k a^3 \text{Im} \left[\frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right]. \quad (2.18)$$

Para la esfera de volumen V y permitividad $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ el coeficiente de extinción se encuentra introduciendo las ecuaciones (2.17) y (2.18) en la ecuación (1.56).

$$C_{ext} = 9 \frac{\omega}{c} \epsilon_m^{3/2} V \frac{\epsilon_2}{[\epsilon_1 + 2\epsilon_m] + \epsilon_2^2}. \quad (2.19)$$

2.2. Plasmones de superficie localizados en una nanopartícula elipsoidal

2.2.1. Sistema de coordenadas elipsoidal

El estudio de la generación de plasmones localizados de superficie en nanopartículas elipsoidales requiere de un gran desarrollo de cálculos si se emplea el sistema de coordenadas cartesiano para estudiar el potencial eléctrico que se origina por el acoplamiento entre las oscilaciones de los electrones libres de una nanopartícula con un campo eléctrico externo.

Por la geometría de la nanopartícula (elipsoide), es conveniente usar el sistema de coordenadas elipsoidal, que está determinado por las siguientes expresiones:

$$\frac{x^2}{a^2 + \epsilon} + \frac{y^2}{b^2 + \epsilon} + \frac{z^2}{c^2 + \epsilon} = 1 \quad -c^2 < \epsilon < \infty, \quad (2.20)$$

$$\frac{x^2}{a^2 + \eta} + \frac{y^2}{b^2 + \eta} + \frac{z^2}{c^2 + \eta} = 1 \quad -b^2 < \eta < -c^2, \quad (2.21)$$

$$\frac{x^2}{a^2 + \zeta} + \frac{y^2}{b^2 + \zeta} + \frac{z^2}{c^2 + \zeta} = 1 \quad -a^2 < \zeta < -b^2. \quad (2.22)$$

La ecuación (2.20) corresponde a la familia de elipsoides confocales con ϵ igual a una constante, la ecuación (2.21) representa la familia de hiperboloides de una hoja con η constante y la ecuación (2.22) es la familia de hiperboloides de dos hojas con ζ constante, como se muestra en la figura (2.1). Las constantes a , b y c son las medidas de los semiejes de un elipsoide centrado en el origen paralelos a los ejes x , y y z del plano cartesiano respectivamente.

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

Los factores de escala de un sistema de coordenadas determinan los operadores diferenciales de manera unívoca, para el caso del sistema de coordenadas elipsoidales las expresiones son las siguientes:

$$h_1 = \frac{1}{2} \left[\frac{(\varepsilon - \eta)(\varepsilon - \zeta)}{(\varepsilon + a^2)(\varepsilon + b^2)(\varepsilon + c^2)} \right]^{(\frac{1}{2})}, \quad (2.23)$$

$$h_2 = \frac{1}{2} \left[\frac{(\eta - \zeta)(\eta - \varepsilon)}{(\eta + a^2)(\eta + b^2)(\eta + c^2)} \right]^{(\frac{1}{2})}, \quad (2.24)$$

$$h_3 = \frac{1}{2} \left[\frac{(\zeta - \eta)(\zeta - \varepsilon)}{(\zeta + a^2)(\zeta + b^2)(\zeta + c^2)} \right]^{(\frac{1}{2})}. \quad (2.25)$$

El *Laplaciano* de una función escalar ψ en coordenadas elipsoidales tiene la expresión

$$\nabla^2 \psi = \left\{ (\eta - \zeta) R_\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(R_\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} \right) + (\zeta - \varepsilon) R_\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \left(R_\eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) + (\varepsilon - \eta) R_\zeta \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(R_\zeta \frac{\partial \psi}{\partial \zeta} \right) \right\}, \quad (2.26)$$

donde $R_q = \sqrt{(q + a^2)(q + b^2)(q + c^2)}$.

Algunas definiciones diferentes se pueden tomar dependiendo del autor. La siguiente figura representa las familias de coordenadas elipsoidales descrito por las ecuaciones (2.20), (2.21) y (2.22).

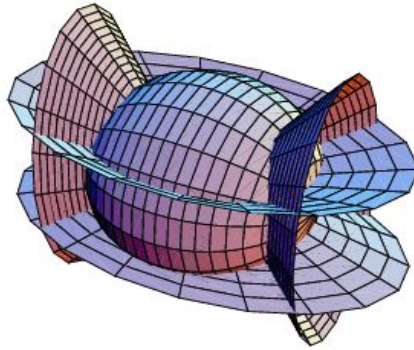


Figura 2.1: Familia de superficies descritas por las ecuaciones (2.20) a (2.22).

Nanopartícula elipsoidal conductora en presencia de un campo eléctrico

El potencial eléctrico de una nanopartícula en la presencia de un campo eléctrico está determinado por la ecuación de *Laplace*, de modo que a través de esta se puede calcular el campo eléctrico conociendo las condiciones de frontera en la superficie de la misma.

La ecuación de *Laplace* para el caso de una nanopartícula elipsoidal iluminada por un campo eléctrico externo debe tener la misma forma que la ecuación (2.26) y debe igualarse a cero, si el potencial es denotado por Φ entonces adquiere la siguiente expresión:

$$\nabla^2 \Phi = \left\{ (\eta - \zeta) R_\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(R_\varepsilon \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon} \right) + (\zeta - \varepsilon) R_\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \left(R_\eta \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) + (\varepsilon - \eta) R_\zeta \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(R_\zeta \frac{\partial \Phi}{\partial \zeta} \right) \right\} = 0, \quad (2.27)$$

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

donde las constantes a , b y c que aparecen de manera implícita en los términos R_q de la ecuación (2.27) son los semiejes de la nanopartícula elipsoidal, y están alineados a los ejes x , y y z del sistema de coordenadas rectangulares respectivamente. Cuando $\varepsilon = 0$ la ecuación (2.20) se ajusta con la superficie de la nanopartícula.

Una de las condiciones impuestas en cálculos posteriores es que la nanopartícula está inmersa en un dieléctrico homogéneo cuya permitividad se denota por ϵ_2 .

Los armónicos elipsoidales son una solución a la ecuación (2.27). En este capítulo se desarrollan soluciones que se ajustan a determinados casos interesantes en la generación de plasmones localizados de superficie analizando la geometría del problema y las propiedades físicas del sistema.

2.2.2. Simetrías del potencial eléctrico para una nanopartícula elipsoidal

Una de las particularidades del potencial eléctrico de una nanopartícula elipsoidal iluminada con un campo eléctrico alineado al eje z , es la simetría que tiene en los octantes del sistema de coordenadas cartesianas respecto cuando z es positivo y cuando z es negativo. Por tal motivo no es necesario calcular el potencial en cada octante del sistema cartesiano, ya que se cumplen las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned}\Phi(x, y, z) &= \Phi(-x, y, z) = \Phi(x, -y, z) = \Phi(-x, -y, z) \\ \Phi(x, y, -z) &= \Phi(-x, y, -z) = \Phi(x, -y, -z) = \Phi(-x, -y, -z)\end{aligned}$$

Si el campo eléctrico es alineado a alguno de los ejes restantes (x o y) también se encuentran relaciones de simetría.

Como en $z = 0$ se tiene un cambio repentino del vector normal a la superficie en ambos lados del eje z , se requiere que los potenciales en ambas regiones sean iguales en todo el plano así como sus derivadas respecto a z .

2.2.3. Cálculo del potencial eléctrico para una nanopartícula elipsoidal

Sea ϕ_1 el potencial dentro de la partícula y ϕ_2 el potencial eléctrico fuera de la misma, ϕ_2 se puede ver como la suma del potencial eléctrico asociado al campo externo aplicado denotado por ϕ_0 y un potencial de perturbación debido a la interacción entre el campo externo y los electrones libres de la nanopartícula denotado por ϕ_p , esto es:

$$\phi_2 = \phi_0 + \phi_p, \quad (2.28)$$

donde ϕ_0 está relacionado con el campo eléctrico externo como $\mathbf{E}_0 = -\nabla\phi_0$.

Supongamos la existencia de un campo eléctrico incidente uniforme alineado a lo largo del eje z , esto es, $\mathbf{E}_0 = E_0\hat{z}$, la expresión del potencial eléctrico del campo externo es $\phi_0 = E_0z$. Tomando en cuentas las ecuaciones (2.20) a (2.22) se determina una función para expresar z en términos de los parámetros ε , η y ζ de las coordenadas elipsoidales, dada por la siguiente ecuación:

$$\phi_0 = E_0 \left[\frac{(\varepsilon + c^2)(\eta + c^2)(\zeta + c^2)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.29)$$

Las condiciones de frontera deben ser tales que los potenciales ϕ_1 y ϕ_2 sean continuos en la superficie de la nanopartícula, donde $\varepsilon = 0$, de modo que se debe cumplir la siguiente ecuación:

$$\phi_1(0, \eta, \zeta) = \phi_0(0, \eta, \zeta) + \phi_p(0, \eta, \zeta). \quad (2.30)$$

El potencial ϕ_0 es una solución a la ecuación de Laplace que puede ser vista como una multiplicación de funciones que dependen de cada una de las variables que describen las coordenadas elipsoidales, de modo que el potencial puede escribirse de la siguiente forma:

$$\phi_0 = K_1 F_1(\varepsilon) F_2(\eta) F_3(\zeta), \quad (2.31)$$

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

donde K_1 y $F_i(q)$ tienen las siguientes expresiones:

$$K_1 = -\frac{E_0}{\sqrt{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}}; \quad F_i(q) = \sqrt{q + c^2}. \quad (2.32)$$

Por la geometría de la partícula se debe cumplir que el potencial eléctrico depende sólo de la variable ε , además, las condiciones de frontera requieren que el potencial dentro y fuera de la partícula valgan lo mismo en $\varepsilon = 0$, esto es, los cambios en η y ζ no afectan su valor si ε se mantiene constante. Por las razones anteriores, la forma que debe tener el potencial para satisfacer la ecuación de *Laplace* en coordenadas elipsoidales tiene la siguiente forma:

$$\Phi(\varepsilon, \eta, \zeta) = F(\varepsilon)\sqrt{\eta + c^2}\sqrt{\zeta + c^2}. \quad (2.33)$$

Sustituyendo el valor de Φ de la ecuación (2.33) en la ecuación de *Laplace* en coordenadas elipsoidales se llega a una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, descrita por la siguiente igualdad:

$$R_\varepsilon \frac{d}{d\varepsilon} \left(R_\varepsilon \frac{dF}{d\varepsilon} \right) - \left(\frac{a^2 + b^2}{4} + \frac{\varepsilon}{2} \right) F = 0. \quad (2.34)$$

Una solución a la ecuación (2.34) es la función $F(\varepsilon) = \sqrt{\varepsilon + c^2}$, que corresponde a la expresión de F_1 del potencial ϕ_0 .

Como la ecuación (2.34) es una ecuación diferencial de segundo grado ordinaria de la que se conoce una solución, es posible encontrar una segunda solución de la siguiente forma [19]:

$$G_1(\varepsilon) = F_1(\varepsilon) \int_\varepsilon^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q}. \quad (2.35)$$

Analizando las condiciones de frontera, se requiere que el potencial ϕ_p de la partícula tenga un valor nulo en $\varepsilon = \infty$, que sea convergente en el origen y que se satisfaga la ecuación (2.30), esto es:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \phi_p = 0. \quad (2.36)$$

Estudiando la expresión para F_1 , se verifica que no satisface la ecuación (2.36), ya que es el potencial debido al campo eléctrico externo y es constante en todo el espacio, por lo tanto, no tiene condiciones de convergencia.

El potencial de la partícula ϕ_p se determina mediante la ecuación (2.35), de modo que adquiere el siguiente valor:

$$\phi_p = C_2 F_2(\varepsilon) \sqrt{\eta + c^2} \sqrt{\zeta + c^2}, \quad (2.37)$$

donde C_2 es una constante que se determina con las condiciones de frontera ya mencionadas anteriormente. El potencial dentro de la nanopartícula debe de ser finito en el origen, de modo que puede tener una forma similar al potencial ϕ_0 acompañado de una constante C_1 , por tal motivo la expresión para el potencial dentro de la nanopartícula está determinada por la siguiente ecuación:

$$\phi_1 = C_1 F_1(\varepsilon) \sqrt{\eta + c^2} \sqrt{\zeta + c^2}. \quad (2.38)$$

Empleando las expresiones para los potenciales ϕ_0 , ϕ_1 y ϕ_p en la ecuación (2.30) se pueden obtener los valores de las variables C_1 y C_2 de la siguiente manera:

$$C_1 \sqrt{\eta + c^2} \sqrt{\zeta + c^2} = -\frac{E_0}{\sqrt{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}} \sqrt{\eta + c^2} \sqrt{\zeta + c^2} + C_2 \sqrt{\eta + c^2} \sqrt{\zeta + c^2} \int_0^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q} \quad (2.39)$$

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

$$\begin{aligned} \Rightarrow C_1 &= -\frac{E_0}{\sqrt{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}} + C_2 \int_0^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q} \\ \Rightarrow C_2 \int_0^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q} - C_1 &= \frac{E_0}{\sqrt{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}}. \end{aligned}$$

El desarrollo de la ecuación (2.39) tiene 2 incógnitas por determinar, C_1 y C_2 , por ello se necesita de una segunda ecuación que las involucre, dicha ecuación es la continuidad de las componentes tangenciales del vector desplazamiento eléctrico \mathbf{D} en la superficie de la nanopartícula ($\varepsilon = 0$):

$$\epsilon \frac{\partial \phi_1}{\partial \varepsilon} = \epsilon_m \frac{\partial \phi_0}{\partial \varepsilon} + \epsilon_m \frac{\partial \phi_p}{\partial \varepsilon} \quad (\varepsilon=0), \quad (2.40)$$

donde ϵ y ϵ_m son las permitividades de la nanopartícula y del dieléctrico en el que está inmersa respectivamente. Colocando los valores de ϕ_0 , ϕ_1 y ϕ_p en la ecuación (2.40) se obtiene la siguiente expresión:

$$\epsilon C_1 \frac{\partial F_1(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \epsilon_m \frac{E_0}{\sqrt{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}} \frac{\partial F_1(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \epsilon_m C_2 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[F_1(\varepsilon) \int_\varepsilon^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q} \right] \quad (\varepsilon = 0). \quad (2.41)$$

Desarrollando los cálculos de las derivadas parciales en la ecuación (2.41) se obtiene el siguiente resultado:

$$\epsilon C_1 = \epsilon_m \frac{E_0}{\sqrt{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}} + \epsilon_m C_2 \left\{ \int_\varepsilon^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q} - \frac{1}{2\sqrt{(\varepsilon + a^2)(\varepsilon + b^2)(\varepsilon + c^2)}} \right\} \quad (\varepsilon = 0). \quad (2.42)$$

Evaluando la expresión (2.42) en $\varepsilon = 0$ se obtiene la segunda ecuación que determina la relación entre las constantes C_1 y C_2 que resuelven las condiciones de frontera para el potencial eléctrico. La segunda ecuación queda determinada por la siguiente igualdad:

$$\epsilon_m C_2 \left[\int_0^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q} - \frac{2}{abc} \right] - \epsilon C_1 = \frac{\epsilon_m E_0}{\sqrt{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}}. \quad (2.43)$$

La ecuación (2.43) y (2.39) determinan el valor de C_1 y C_2 , de manera que el potencial dentro de la partícula ϕ_1 y el potencial de perturbación ϕ_p están determinados por las siguientes ecuaciones:

$$\phi_1 = \frac{\phi_0}{1 + \frac{L_3(\epsilon - \epsilon_m)}{\epsilon_m}}; \quad (2.44)$$

$$\phi_p = \phi_0 \frac{\frac{abc}{2} \frac{\epsilon_m - \epsilon}{\epsilon_m} \int_\varepsilon^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q}}{1 + \frac{L_3(\epsilon - \epsilon_m)}{\epsilon_m}}, \quad (2.45)$$

donde L_3 tiene el siguiente valor:

$$L_3 = \int_0^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)R_q} = \int_0^\infty \frac{dq}{(q + c^2)R_q}. \quad (2.46)$$

Aspectos importantes del potencial ϕ_p

La ecuación (2.45) es una solución para el caso en el que se ilumina una nanopartícula elipsoidal de la forma $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{z}$, sin embargo, el campo eléctrico incidente puede estar alineado a cualquiera

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

de los ejes x , y o z , por lo tanto, para un campo eléctrico de la forma $\mathbf{E}_0 = E_0\hat{x}$ el potencial eléctrico dentro y fuera de la partícula se determina por las siguientes ecuaciones:

$$\phi_1 = \frac{\phi_0}{1 + \frac{L_1(\epsilon - \epsilon_m)}{\epsilon_m}}; \quad (2.47)$$

$$\phi_p = \phi_0 \frac{\frac{abc}{2} \frac{\epsilon_m - \epsilon}{\epsilon_m} \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{dq}{(q+a^2)R_q}}{1 + \frac{L_1(\epsilon - \epsilon_m)}{\epsilon_m}}, \quad (2.48)$$

donde L_1 tiene el siguiente valor:

$$L_1 = \int_0^{\infty} \frac{dq}{(q+a^2)R_q}. \quad (2.49)$$

Para un campo eléctrico incidente de la forma $\mathbf{E}_0 = E_0\hat{y}$, las expresiones para el potencial eléctrico ϕ_1 y ϕ_p tienen la siguiente forma:

$$\phi_1 = \frac{\phi_0}{1 + \frac{L_2(\epsilon - \epsilon_m)}{\epsilon_m}}; \quad (2.50)$$

$$\phi_p = \phi_0 \frac{\frac{abc}{2} \frac{\epsilon_m - \epsilon}{\epsilon_m} \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{dq}{(q+b^2)R_q}}{1 + \frac{L_2(\epsilon - \epsilon_m)}{\epsilon_m}}, \quad (2.51)$$

donde L_2 tiene el siguiente valor:

$$L_2 = \int_0^{\infty} \frac{dq}{(q+b^2)R_q}. \quad (2.52)$$

Las integrales L_1 , L_2 y L_3 son integrales elipsoidales de segunda especie cuya solución analítica es posible bajo algunas consideraciones que se verán a lo largo de este capítulo, sin embargo, no es posible obtener una solución analítica si se tratan de resolver de manera arbitraria. Para encontrar un valor aproximado de ellas es necesario emplear métodos numéricos de integración.

Imponiendo que la relación de orden para los semiejes es $a > b > c$, es posible encontrar una solución a las integrales que aparecen en las ecuaciones (2.45), (2.48) y (2.51) a distancias suficientemente lejanas al origen de la nanopartícula, esto es, cuando $r^2 \approx \epsilon \gg a$, de modo que la integral en las tres ecuaciones se expresan de la siguiente manera:

$$\int_{\epsilon}^{\infty} \frac{dq}{(q+a^2)R_q} \approx \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{dq}{q^{\frac{5}{2}}} \quad (r^2 \approx \epsilon \gg a). \quad (2.53)$$

Así, se puede escribir ϕ_p de la siguiente manera:

$$\phi_p \approx \frac{E_0 \cos(\theta)}{r^2} \frac{\frac{abc}{3\epsilon^{3/2}} \frac{\epsilon_m - \epsilon}{\epsilon_m}}{1 + \frac{L_i(\epsilon - \epsilon_m)}{\epsilon_m}} \quad \text{con } i = 1, 2, 3. \quad (2.54)$$

Empleando la definición para el potencial eléctrico de un dipolo ideal se expresan los resultados anteriores en términos del momento dipolar \mathbf{P} y su polarizabilidad α_i donde cada $i = 1, 2, 3$ hace referencia a la alineación del campo eléctrico incidente con alguno de los semiejes de la nanopartícula.

El momento dipolar de la nanopartícula debido a la presencia del campo externo queda expresado de la siguiente manera:

$$\mathbf{P} = \epsilon_m \alpha_i \mathbf{E}_0; \quad \alpha_i = 4\pi abc \frac{\epsilon - \epsilon_m}{3\epsilon_m + 3L_i(\epsilon - \epsilon_m)}. \quad (2.55)$$

Así como para el caso de una nanopartícula esférica se encuentra la condición de Fröhlich para la generación del plasmón localizado de superficie, para una nanopartícula elipsoidal también es posible determinar la generación de dicho plasmón si se estudia la polarizabilidad α_i , siempre y cuando se conozca el valor de la integral que aparece en cada una de ellas.

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

2.2.4. Notación tensorial para el momento dipolar \mathbf{P}

Los cálculos realizados en la subsección anterior para obtener los valores del potencial eléctrico dentro y fuera de la nanopartícula se determinaron imponiendo que el campo eléctrico externo está alineado a alguno de los semiejes del elipsoide, sin embargo, al realizar el experimento no es sencillo hacer esa alineación debido a las dimensiones de las mismas, por lo que de manera más general se puede proponer un campo externo arbitrario denotado por \mathbf{E}_0 cuyo único requerimiento es estar polarizado linealmente, dicho campo se puede descomponer en sus tres componentes respecto al sistema de coordenadas cartesiano, así, el vector de polarizabilidad tiene la siguiente expresión:

$$\mathbf{P} = \epsilon_m(\alpha_1 E_{0x} \hat{e}_x + \alpha_2 E_{0y} \hat{e}_y + \alpha_3 E_{0z} \hat{e}_z), \quad (2.56)$$

donde E_{0x} , E_{0y} y E_{0z} son las componentes del vector \mathbf{E}_0 y cada componente del campo eléctrico externo está polarizado linealmente sobre cada uno de los semiejes de la nanopartícula a , b y c respectivamente.

Analizar el problema empleando un sistema de coordenadas primado (x', y', z') que sea descrito por el sistema de coordenadas cartesiano (x, y, z) es de suma utilidad por las diversas configuraciones que pueden existir para generar plasmones localizados de superficie. Si se impone un campo eléctrico incidente cuya propagación va en la dirección z' y está polarizado en x' , el coeficiente de absorción tendrá la siguiente expresión:

$$C_{abs,x'} = \frac{KIm(P_{x'})}{\epsilon_m E_{0x'}}. \quad (2.57)$$

Los resultados de la ecuación (2.57) son obtenidos a partir del *Teorema óptico*.

Para determinar el valor de la ecuación (2.57) es necesario expresarla en términos conocidos, por tal motivo primero se debe hallar la representación matricial para los términos del momento dipolar.

Las componentes del momento dipolar \mathbf{P} se pueden escribir en términos de matrices, así como las polarizabilidades α_i , de modo que la relación entre ellas con el campo eléctrico incidente \mathbf{E}_0 está determinado por la siguiente ecuación matricial:

$$\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \epsilon_m \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ E_{0z} \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

La ecuación (2.58) se puede reducir un poco empleando la siguiente notación:

$$[P] = \epsilon_m \bar{\alpha} [E_0]. \quad (2.59)$$

Para un campo polarizado linealmente a lo largo de uno de los ejes primados, por ejemplo x' , se tiene un coeficiente de absorción descrito por la siguiente ecuación:

$$C_{abs,x'} = KIm [\alpha_1 a_{11}^2 + \alpha_2 a_{21}^2 + \alpha_3 a_{31}^2]. \quad (2.60)$$

donde $a_{ij} = \hat{e}_i \cdot \hat{e}'_j$, \hat{e}_i corresponde a los vectores de la base cartesiana y cada \hat{e}'_j corresponde a un vector de la base del sistema coordenado primado.

Las propiedades de ortonormalidad de ambas bases cumplen la condición $a_{11}^2 + a_{21}^2 + a_{31}^2 = 1$. Con las mismas condiciones impuestas para el coeficiente de absorción, se obtiene el coeficiente de esparcimiento, denotado por $C_{sca,x'}$, que está dado por la siguiente expresión:

$$C_{sca,x'} = \frac{K^4}{6\pi} \left(\|\alpha_1\|^2 a_{11}^2 + \|\alpha_2\|^2 a_{21}^2 + \|\alpha_3\|^2 a_{31}^2 \right). \quad (2.61)$$

Expresiones similares para una alineación del campo eléctrico incidente respecto a y' y z' pueden ser determinadas analizando la ecuación (2.60) y (2.61).

La polarizabilidad $\bar{\alpha}$ descrita mediante la matriz de la ecuación (2.58) es conocida como el tensor de polarizabilidad y es de gran utilidad por su notación compacta para describir el momento dipolar cuando el campo eléctrico incidente es descrito bajo un sistema de coordenadas primado.

2.2.5. Soluciones particulares para la generación de plasmones de superficie en nanopartículas elipsoidales

Las integrales que se encuentran en las polarizabilidades α_i no cuentan con una solución analítica si se resuelve de manera arbitraria, de modo que sólo es posible obtener un valor aproximado empleando métodos numéricos. Un caso particular que permite obtener soluciones analíticas es cuando la geometría de la nanopartícula elipsoidal se restringe a esferoides, esto es, dos de los semiejes del elipsoide deben tener el mismo valor, por lo que dos casos de interés pueden estudiarse. Supongamos que la relación de orden de los semiejes para alguna nanopartícula elipsoidal metálica es $a > b > c$ y que cada semieje de esta se encuentra alineado a la base cartesiana ($\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$) respectivamente (véase figura 2.2), además, es iluminada con un campo eléctrico uniforme que se propaga a lo largo de la dirección z y está polarizado linealmente a lo largo del eje x .

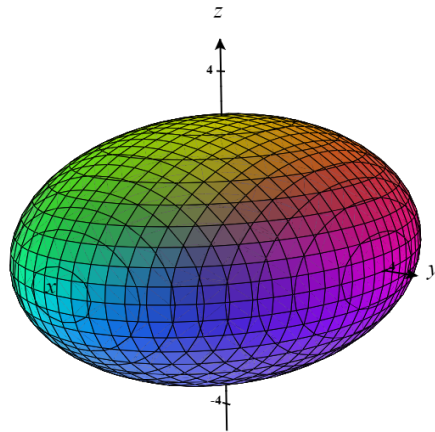


Figura 2.2: Elipsoide centrada en el origen cuyos semiejes $a = 5$, $b = 4$ y $c = 3$ están alineados al sistema de coordenadas cartesiano x , y y z respectivamente.

Esferoide Oblato

Si los semiejes a y b de la nanopartícula elipsoidal son iguales, la relación de orden para los semiejes es $a = b > c$, a esta geometría se le conoce como esferoide oblata (véase figura 2.3).

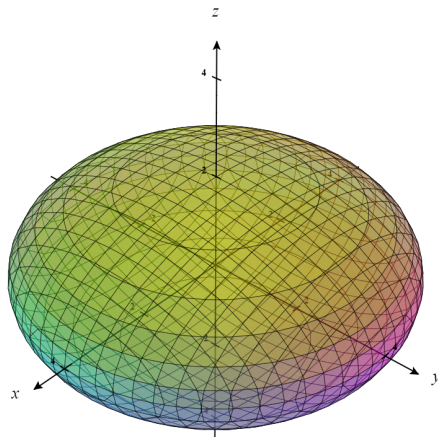


Figura 2.3: Esferoide oblata centrada en el origen cuyos semiejes $a = 4$, $b = 4$ y $c = 2$ están alineados al sistema de coordenadas cartesiano x , y y z respectivamente.

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

Para un esferoide oblato dos de las polarizabilidades α_i son diferentes bajo la acción de un campo eléctrico incidente polarizado linealmente de manera arbitraria. Las integrales L_i cumplen con la condición $L_1 + L_2 + L_3 = 1$, por lo que solamente se necesitan hallar α_1 o α_3 para tener un conocimiento completo del momento dipolar eléctrico \mathbf{P} . Si el campo eléctrico incidente se propaga a lo largo del eje z y está polarizado linealmente lo largo del eje x , el valor de la integral para el esferoide oblato L_1 se puede expresar mediante la siguiente ecuación:

$$L_1 = \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)\sqrt{(a^2 + q)(a^2 + q)(c^2 + q)}} = \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)^2\sqrt{(c^2 + q)}}. \quad (2.62)$$

La integral en la ecuación (2.62) tiene solución analítica (Véase apéndice A), la cual está determinada por la siguiente expresión:

$$L_1 = \frac{g(e)}{2e^2} \left[\frac{\pi}{2} - \tan^{-1}(g(e)) \right] - \frac{g^2(e)}{2}, \quad (2.63)$$

donde los valores de $g(e)$ y e tienen los siguientes valores:

$$e^2 = 1 - \frac{c^2}{a^2}; \quad g(e) = \sqrt{\frac{1 - e^2}{e^2}}.$$

El término e se conoce como *excentricidad* y describe la forma de la nanopartícula oblata, si $e = 1$ la geometría correspondiente es un disco y conforme e disminuya adquiere la forma de la nanopartícula oblata hasta llegar a $e = 0$, que corresponde a una esfera.

La generación del plasmón localizado de superficie para esta geometría está determinado por la polarizabilidad α_1 y la permitividad eléctrica ϵ que depende de la frecuencia de iluminación ω . La ecuación 2.55 determina la generación del plasmón localizado de superficie.

Esferoide Prolata

Si la nanopartícula elipsoidal cumple con la relación de orden $a > b = c$, entonces la geometría que se estudia es conocida como esferoide prolata, la figura 2.4 muestra la geometría descrita.

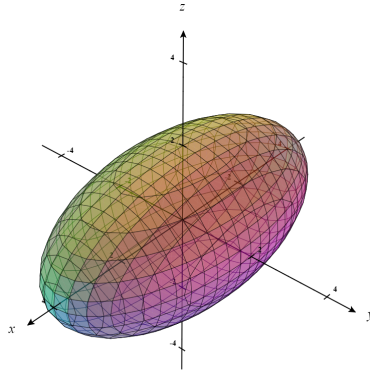


Figura 2.4: Esferoide prolata centrada en el origen cuyos semiejes $a = 4$, $b = 2$ y $c = 2$ están alineados al sistema de coordenadas cartesiano x , y y z respectivamente.

Como en el caso del esferoide oblato, solamente dos de las polarizabilidades son diferentes bajo la acción de un campo eléctrico incidente polarizado linealmente de manera arbitraria, dichas polarizabilidades son α_1 y α_3 . Conociendo el valor de alguna de las polarizabilidades se obtiene el conocimiento completo del momento dipolar eléctrico \mathbf{P} . Suponiendo que el campo eléctrico externo está polarizado linealmente sobre el eje x y se propaga en la dirección z , se obtiene el valor de α_1 . Con las condiciones mencionadas anteriormente, el valor de la integral L_1 está determinado

**CAPÍTULO 2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS
ELIPSOIDALES**
2.2. PLASMONES DE SUPERFICIE LOCALIZADOS EN UNA NANOPARTÍCULA
ELIPSOIDAL

por la siguiente expresión:

$$L_1 = \int_0^\infty \frac{dq}{(a+q)\sqrt{(a^2+q)(c^2+q)(c^2+q)}} = \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2+q)^{3/2}(c^2+q)}. \quad (2.64)$$

La integral (2.63) tiene solución analítica (véase apéndice A), dicha solución es:

$$L_1 = \frac{1-e^2}{e^2} \left(-1 + \frac{1}{2e} \ln \left(\frac{1+e}{1-e} \right) \right), \quad (2.65)$$

donde el término e de la ecuación (2.64) tiene la misma expresión que para el caso del esferoide oblatos. En este caso cuando $e = 1$ sería una línea a lo largo del eje x , cuando e disminuya hasta llegar al valor de cero se tendrá una geometría esférica.

Al igual que el caso para una esferoide oblatos, la ecuación (2.55) determina la frecuencia de iluminación a la cual se origina el plasmón localizado de superficie en la nanopartícula.

Una propiedad que cumplen las integrales L_i que aparecen en las polarizabilidades es la siguiente

$$L_1 + L_2 + L_3 = 1. \quad (2.66)$$

Para los casos de los esferoides es necesario saber una de las tres polarizabilidades para determinar de manera unívoca el valor de las restantes, pues la que falta se puede obtener empleando la ecuación (2.66).

Uno de los factores importantes en la generación de plasmones localizados de superficie en nanopartículas esferoidales es el valor de las integrales denotadas por L_1 en términos de su excentricidad, ya que dependiendo de su valor el plasmón localizado se generará en valores específicos de frecuencias de iluminación. La siguiente gráfica muestra el valor de L_1 respecto a su excentricidad

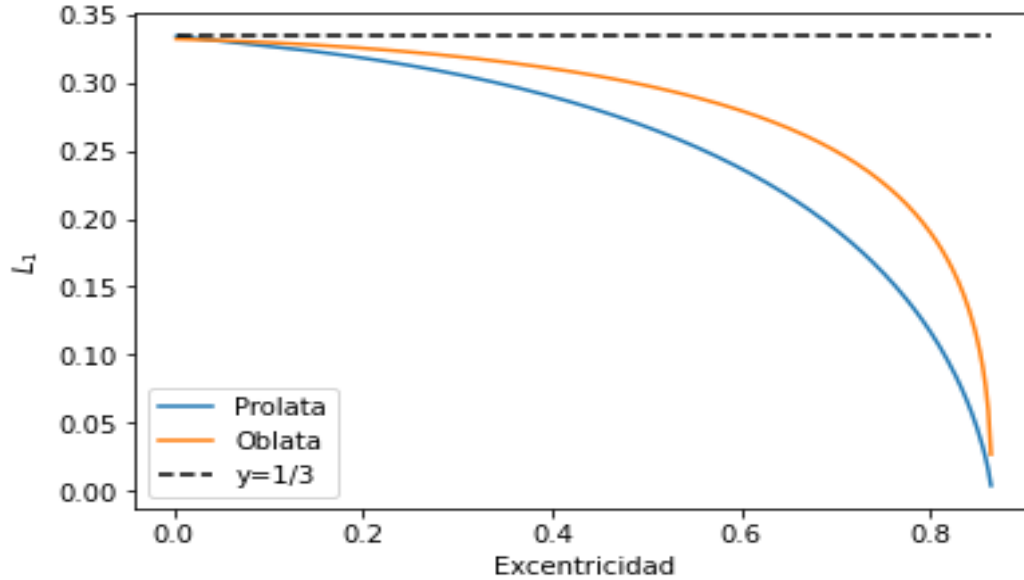


Figura 2.5: Valor de L_1 para una esferoide oblata y prolata en términos de su excentricidad e .

Capítulo 3

Efectos en la generación de *LSP* en *NP*'s esféricas debido a su tamaño, composición y orientación

En este capítulo se presenta un estudio detallado de la generación de plasmones localizados de superficie en nanopartículas metálicas esféricas de oro y plata cuyos parámetros de tamaño son variados con el objetivo de determinar las frecuencias a las que éste es generado, así como la relación que existe entre dicha frecuencia y la geometría de la nanopartícula. Uno de los parámetros utilizados para hacer el estudio será la excentricidad e de las esferoides presentado en el capítulo 2.

Como se ha mencionado en la introducción de este trabajo y a lo largo del capítulo 1, la generación del plasmón localizado de superficie depende de la permitividad eléctrica $\epsilon(\omega)$ de la nanopartícula, donde ω es la frecuencia de la luz incidente. En este capítulo se estudian casos particulares en lo que se refiere a la composición química de la nanopartícula, en específico, se emplean materiales como el oro y la plata para modelar la función dieléctrica [20] y determinar las frecuencias ω_{LSP} para la generación del plasmón localizado de superficie. En el mismo se hace una revisión a investigaciones en las que se determinan las propiedades ópticas de manera experimental ([21] - [27]) para hacer una comparación entre estos datos y el modelo de *Drude* que describe la función dieléctrica para un mar de electrones libres [21] (véase sección 1.2).

Así mismo, se realiza el estudio de la generación del plasmón localizado de superficie haciendo variaciones en la orientación de la nanopartícula esférica respecto a la polarización lineal de un haz de luz incidente. Finalmente, se presentan los resultados de la generación del plasmón localizado de superficie cuando las esferoides de oro y plata se encuentran inmersas en diversos dieléctricos.

3.1. Generación de *LSP* en nanopartículas esféricas en función de su radio

Un caso especial de los cálculos realizados para la generación de *LSP* en nanopartículas elipsoidales es cuando los tres semiejes del elipsoide tienen el mismo valor. La frecuencia para generar el plasmón localizado de superficie en nanopartículas esféricas se determina encontrando el máximo en el coeficiente de esparcimiento C_{sca} de la ecuación (2.17), el término a^6 que se encuentra en dicha ecuación funciona como un factor de escala que no cambia el valor de la frecuencia ω_{LSP} . Por la geometría de la nanopartícula no es necesario alinear el campo eléctrico incidente de manera paralela a alguno de los semiejes, esto es, existe simetría azimutal en el problema. Como la esfera es un caso en que tres de los semiejes de un elipsoide miden lo mismo, las integrales L_i que aparecen

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE *LSP* EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

en las polarizabilidades α_i tienen el mismo valor, esto es, $L_i = \frac{1}{3}$. La siguiente figura muestra las curvas de la función C_{sca} para una nanopartícula esférica de plata en aproximación cuasiestática con veinte diferentes tamaños de radio a .

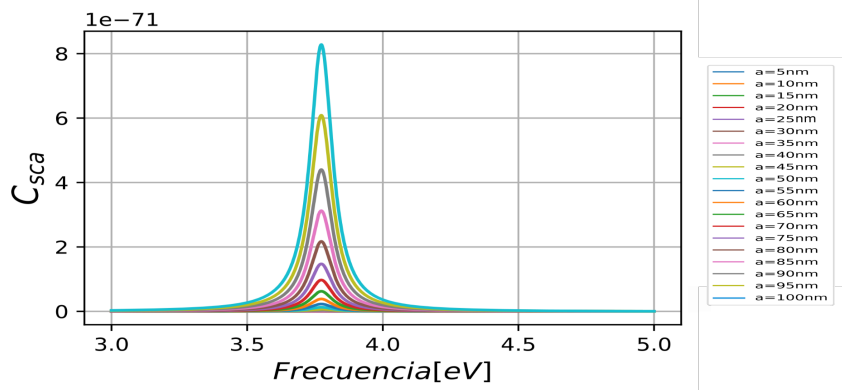


Figura 3.1: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas de plata de diferentes tamaños.

Como se puede observar, el máximo para el coeficiente de esparcimiento en la figura 3.1 se encuentra en el mismo valor de frecuencia para todos los radios empleados, la diferencia entre ellas es el factor de escala. El coeficiente de esparcimiento es mayor cuando el radio de la esfera es mayor, y crece a la sexta potencia con el mismo. La razón por la que la frecuencia de generación es la misma a pesar de que el radio de la esfera es diferente se debe a la reducción de cálculos resultante de la aproximación cuasiestática [22].

El valor de la permitividad eléctrica de la nanopartícula $\epsilon(\omega)$ empleada en la gráfica mostrada en la figura 3.1 se modeló con la ecuación (1.24) (modelo de *Lorentz-Drude*) para una nanopartícula de plata inmersa en aire $\epsilon_m \approx 1$, tomando un coeficiente gamma $\gamma = 0,1 \text{ eV}$ y una constante $\epsilon_\infty = 3,7$ para considerar los saltos interbanda que no son tomados en cuenta por la ecuación (1.20). El valor de la frecuencia para la generación del plasmón localizado de superficie es $\omega_{LSP} = 3,77 \text{ eV}$, correspondiente a una longitud de onda $\lambda_{LSP} = 328,90 \text{ nm}$. Empleando los datos experimentales obtenidos por Johnson y Christy [21] y Derkachova [23] para el caso de la plata, el valor de la frecuencia que genera el plasmón localizado de superficie es $\omega_{LSP,exp} = 3,5 \text{ eV}$, correspondiente a una longitud de onda $\lambda_{LSP,exp} = 354,20 \text{ nm}$. El ancho a la mitad del máximo de cada curva expuesta en la figura 3.1 es de $0,098 \text{ eV}$ ($9,5 \text{ nm}$).

3.2. Generación de *LSP* en nanopartículas esféricas en función de su tamaño

La generación del plasmón localizado de superficie en nanopartículas esféricas está relacionado de manera directa con el valor de la integral L_i (ec. (2.55)), dicha integral depende completamente de las dimensiones de los semiejes de la nanopartícula, esto es, de su tamaño [24], para los casos de esferoides el cambio de L_i está determinado por la excentricidad e [25]. A diferentes tipos de excentricidad corresponderá una sola frecuencia que generará el plasmón cuando el campo eléctrico externo está polarizado linealmente a alguno de los semiejes de la nanopartícula, dicha frecuencia es determinada por el máximo del coeficiente de esparcimiento dado por la ecuación (2.61).

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE *LSP* EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

3.2.1. Nanopartículas Oblatas

En este apartado se muestran gráficas del coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas variando sus dimensiones. El campo eléctrico incidente cumple con tener su vector de onda \mathbf{K} paralelo al eje z y estar polarizado linealmente al eje x . La figura 3.2 muestra la configuración antes descrita.

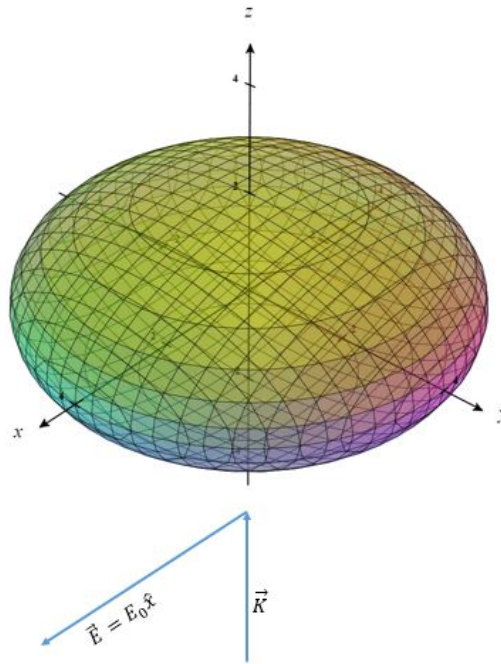


Figura 3.2: Configuración para determinar la longitud de onda que excita el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas. El campo eléctrico incidente se propaga a lo largo del eje z y está polarizado linealmente a lo largo del eje x .

Los gráficos mostrados a continuación corresponden a nanopartículas oblatas de plata inmersas en aire en la que se emplea el modelo de *Lorentz-Drude* correspondiente a la ecuación (1.24) para la función dieléctrica $\epsilon(\omega)$.

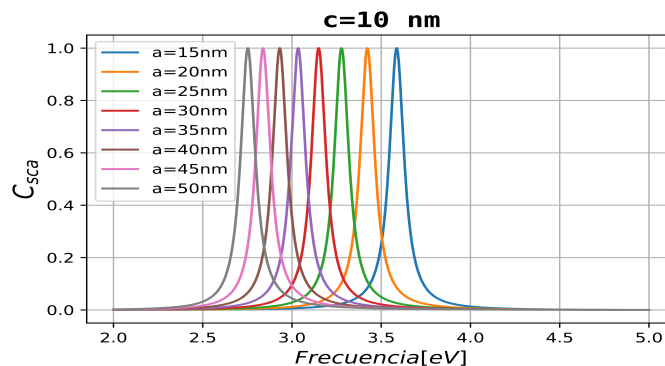


Figura 3.3: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 10 \text{ nm}$.

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE *LSP* EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

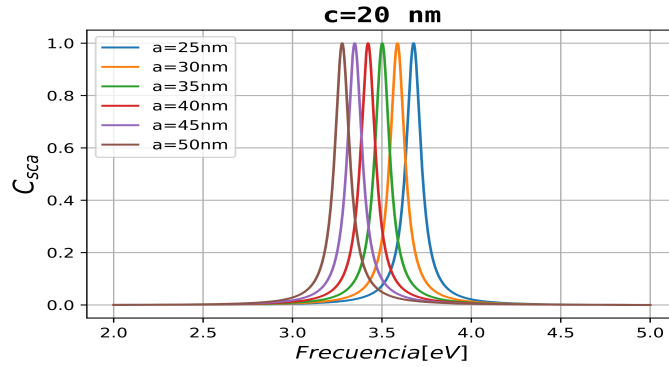


Figura 3.4: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 20 \text{ nm}$.

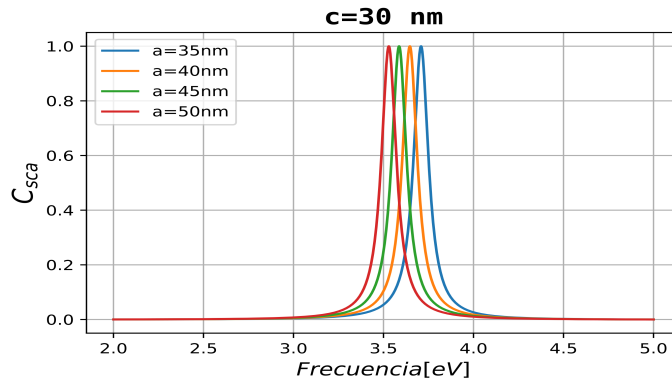


Figura 3.5: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 30 \text{ nm}$.

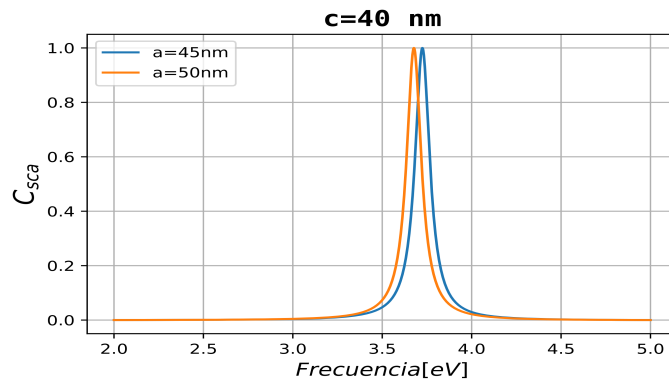


Figura 3.6: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 40 \text{ nm}$.

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE *LSP* EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

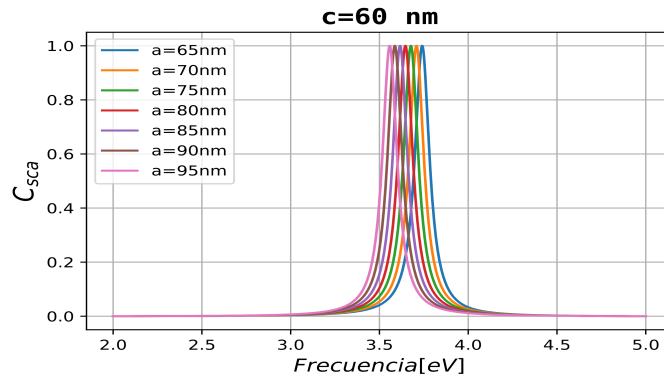


Figura 3.7: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 60$ nm.

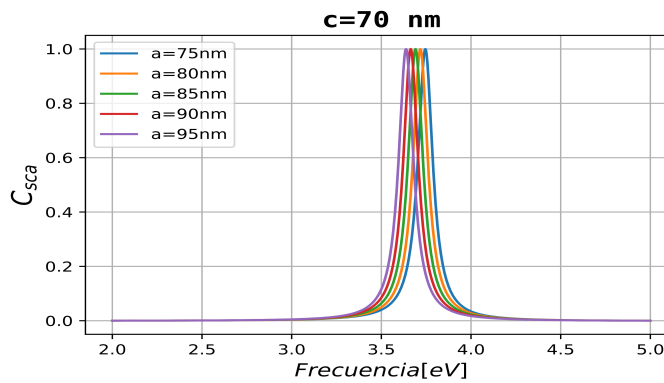


Figura 3.8: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 70$ nm.

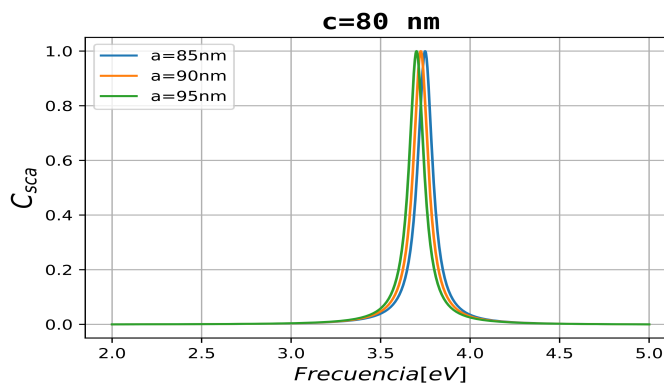


Figura 3.9: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 80$ nm.

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE LSP EN NP 'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

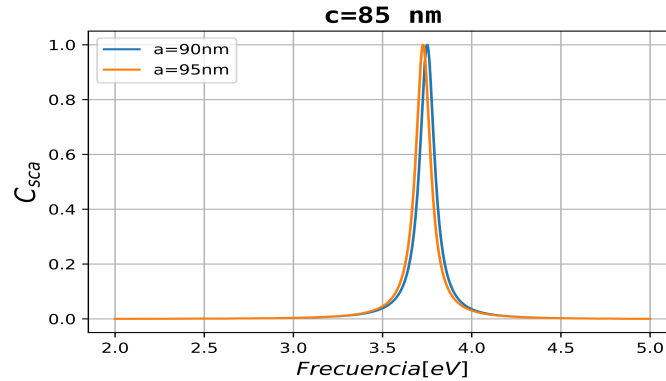


Figura 3.10: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas oblatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $c = 85 \text{ nm}$.

Así como para el caso de nanopartículas esféricas de plata, el ancho de banda para cada una de las curvas mostradas en las figuras 3.3 a 3.10 es de $0,098 \text{ eV}$ ($9,5 \text{ nm}$). En la siguiente página se muestra la tabla de frecuencias ω_{LSP} correspondientes a las longitudes de onda λ_{LSP} que generan el plasmón localizado de superficie para los casos mostrados en las figuras 3.3 a 3.10 cuando el campo eléctrico está polarizado linealmente con el eje x y se propaga a lo largo del eje z (véase figura 3.2). En la misma se muestran las longitudes de onda $\lambda_{LSP,exp}$ que generan el plasmón localizado tomando en cuenta los datos obtenidos por Johnson y Christy [21] y Derkachova [23].

Las gráficas mostradas en las figuras anteriores sobre el coeficiente de esparcimiento y las que se muestran en resultados posteriores se realizaron con la paquetería *matplotlib.pyplot* del software libre *Anaconda Navigator*.

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE *LSP* EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

| Esferoide oblata (<i>Ag</i>) | | | | |
|--------------------------------|---------------|---------------------|----------------------|--------------------------|
| <i>a</i> [nm] | <i>c</i> [nm] | ω_{LSP} [eV] | λ_{LSP} [nm] | $\lambda_{LSP,exp}$ [nm] |
| 15 | 10 | 3.58 | 345.72 | 367.95 |
| 20 | 10 | 3.42 | 362.29 | 381.53 |
| 25 | 10 | 3.27 | 378.34 | 381.53 |
| 30 | 10 | 3.14 | 393.75 | 397.43 |
| 35 | 10 | 3.03 | 408.65 | 413.33 |
| 40 | 10 | 2.93 | 423.05 | 430.55 |
| 45 | 10 | 2.83 | 436.94 | 430.55 |
| 50 | 10 | 2.75 | 450.44 | 450.90 |
| 25 | 20 | 3.67 | 337.22 | 354.28 |
| 30 | 20 | 3.58 | 345.72 | 367.95 |
| 35 | 20 | 3.50 | 354.12 | 367.95 |
| 40 | 20 | 3.42 | 362.29 | 381.53 |
| 45 | 20 | 3.34 | 370.41 | 381.53 |
| 50 | 20 | 3.27 | 378.34 | 381.53 |
| 35 | 30 | 3.70 | 334.39 | 354.28 |
| 40 | 30 | 3.64 | 340.09 | 367.95 |
| 45 | 30 | 3.58 | 345.72 | 367.95 |
| 50 | 30 | 3.52 | 351.34 | 367.95 |
| 45 | 40 | 3.74 | 332.94 | 354.28 |
| 50 | 40 | 3.67 | 337.22 | 354.28 |
| 65 | 60 | 3.74 | 331.49 | 354.28 |
| 70 | 60 | 3.70 | 334.49 | 354.28 |
| 75 | 60 | 3.67 | 337.22 | 354.28 |
| 80 | 60 | 3.64 | 340.09 | 367.95 |
| 85 | 60 | 3.61 | 342.88 | 367.95 |
| 90 | 60 | 3.58 | 345.72 | 367.95 |
| 95 | 60 | 3.55 | 348.54 | 367.95 |
| 75 | 70 | 3.74 | 331.08 | 354.28 |
| 80 | 70 | 3.71 | 333.50 | 354.28 |
| 85 | 70 | 3.69 | 335.98 | 354.28 |
| 90 | 70 | 3.66 | 338.46 | 367.95 |
| 95 | 70 | 3.63 | 340.91 | 367.95 |
| 85 | 80 | 3.74 | 330.78 | 354.28 |
| 90 | 80 | 3.72 | 332.94 | 354.28 |
| 95 | 80 | 3.70 | 335.06 | 354.28 |
| 90 | 85 | 3.75 | 330.66 | 354.28 |
| 95 | 85 | 3.72 | 332.69 | 354.28 |

Tabla 3.1: Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de plata.

La Tabla 3.1 muestra las frecuencias a las que se genera el plasmón localizado de superficie para nanopartículas oblatas de plata cuyas dimensiones de sus semiejes se encuentran en el intervalo $[10,95]$ nm. La siguiente tabla muestra los resultados para nanopartículas oblatas de oro bajo las mismas consideraciones geométricas que se hicieron para el caso de la figura 3.2, de igual modo se considera que el dieléctrico que rodea el esferoide es aire. Se considera un valor para la frecuencia de plasma para el oro dado por $\omega_p = 9,01$ eV con una constante $\epsilon_\infty = 9,84$ y un valor de $\gamma = 0,07$ eV [18]. El ancho de banda a la mitad del máximo para este caso es de $0,069$ eV ($13,2$ nm). Para estudiar el comportamiento de *LSP* se han utilizado las mismas dimensiones que para el caso de

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE *LSP* EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

la plata (figura 3.3-3.10).

| Esferoide oblata (<i>Au</i>) | | | | |
|--------------------------------|---------------|---------------------|----------------------|--------------------------|
| <i>a</i> [nm] | <i>c</i> [nm] | ω_{LSP} [eV] | λ_{LSP} [nm] | $\lambda_{LSP,exp}$ [nm] |
| 15 | 10 | 2.55 | 484.86 | 521.00 |
| 20 | 10 | 2.49 | 497.76 | 521.00 |
| 25 | 10 | 2.43 | 508.49 | 548.67 |
| 30 | 10 | 2.38 | 520.01 | 548.67 |
| 35 | 10 | 2.33 | 531.31 | 548.67 |
| 40 | 10 | 2.28 | 542.40 | 548.67 |
| 45 | 10 | 2.24 | 553.29 | 582.15 |
| 50 | 10 | 2.19 | 563.94 | 582.15 |
| 25 | 20 | 2.58 | 478.91 | 521.00 |
| 30 | 20 | 2.55 | 484.86 | 521.00 |
| 35 | 20 | 2.52 | 490.80 | 521.00 |
| 40 | 20 | 2.49 | 496.76 | 521.00 |
| 45 | 20 | 2.46 | 502.62 | 521.00 |
| 50 | 20 | 2.43 | 508.49 | 521.00 |
| 35 | 30 | 2.60 | 476.86 | 521.00 |
| 40 | 30 | 2.57 | 480.86 | 521.00 |
| 45 | 30 | 2.55 | 484.86 | 521.00 |
| 50 | 30 | 2.53 | 488.82 | 521.00 |
| 45 | 40 | 2.60 | 475.87 | 521.00 |
| 50 | 40 | 2.58 | 478.91 | 521.00 |
| 65 | 60 | 2.61 | 474.89 | 521.00 |
| 70 | 60 | 2.60 | 476.86 | 521.00 |
| 75 | 60 | 2.58 | 478.91 | 521.00 |
| 80 | 60 | 2.57 | 480.36 | 521.00 |
| 85 | 60 | 2.56 | 482.88 | 521.00 |
| 90 | 60 | 2.55 | 484.86 | 521.00 |
| 95 | 60 | 2.54 | 486.86 | 521.00 |
| 75 | 70 | 2.61 | 474.62 | 521.00 |
| 80 | 70 | 2.60 | 476.31 | 521.00 |
| 85 | 70 | 2.59 | 478.02 | 521.00 |
| 90 | 70 | 2.58 | 479.74 | 521.00 |
| 95 | 70 | 2.57 | 481.42 | 521.00 |
| 85 | 80 | 2.61 | 474.40 | 521.00 |
| 90 | 80 | 2.60 | 475.87 | 521.00 |
| 95 | 80 | 2.59 | 477.41 | 521.00 |
| 90 | 85 | 2.61 | 474.29 | 521.00 |
| 95 | 85 | 2.60 | 475.71 | 521.00 |

Tabla 3.2: Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de oro.

Los valores de la parte real y compleja del índice de refracción para el oro y la plata tomados de los datos reportados por Johnson y Christy [21], permiten determinar el valor experimental de la función dieléctrica para dichos metales, la razón por la que se repite la longitud de onda experimental que genera el plasmón localizado de superficie en las tablas 3.1 y 3.2 es la separación entre los datos experimentales correspondiente a las frecuencias empleadas, analizando los resultados teóricos de ambas tablas se puede verificar que al variar el semieje *a* de la nanopartículas por 5

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE *LSP* EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

nm , dejando fijo el valor del semieje c , puede llegar a haber un cambio en la longitud de onda que genera dicho plasmón de $1,42 nm$, cantidad pequeña en comparación a la separación de los datos experimentales.

Para los datos mostrados en la tabla 3.1 correspondientes a la nanopartícula oblata de plata, el rango de longitudes de onda en el que se genera el plasmón localizado de superficie para los tamaños seleccionados en las figuras 3.3 a 3.10 va de los $300 nm$ a los $450 nm$. Para nanopartículas oblatas de oro, el rango de frecuencias que genera el plasmón va de $470 nm$ a $570 nm$. Ambos rangos de longitudes de onda se encuentran por debajo de la longitud de onda correspondiente a la frecuencia de plasma de cada material, además, los datos se encuentran en la región visible del espectro electromagnético, donde no se dan lugar fenómenos cuánticos y el modelo de Drude es más preciso en comparación con la región ultravioleta.

3.2.2. Nanopartículas Prolatas

Las siguientes gráficas muestran el coeficiente de esparcimiento para nanopartículas prolatas de plata inmersa en aire. Las condiciones para su generación son tales que el campo eléctrico incidente su vector de onda \mathbf{K} paralelo al eje z y está polarizado linealmente a lo largo del eje x . La orientación de la nanopartícula a lo largo de los ejes cartesianos se muestra en la figura 2.4.

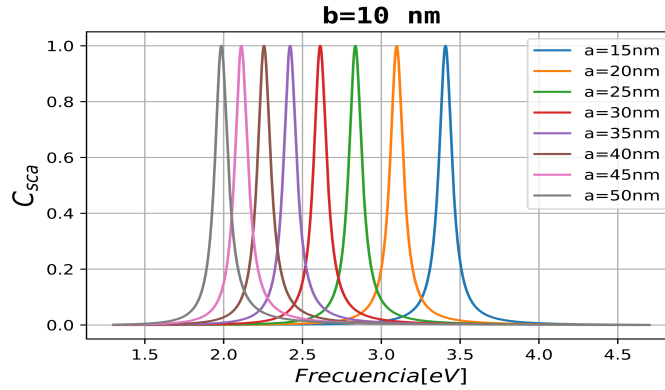


Figura 3.11: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 10 nm$.

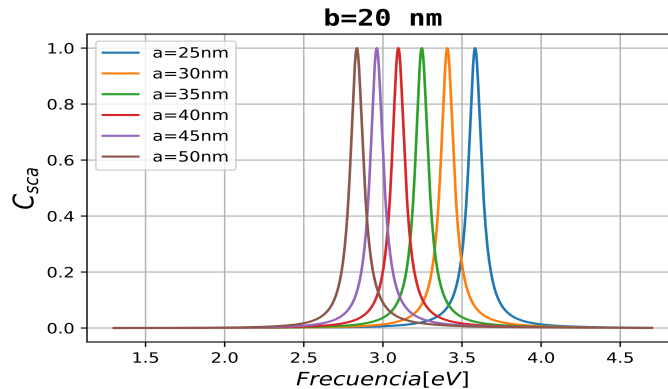


Figura 3.12: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 20 nm$.

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE *LSP* EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

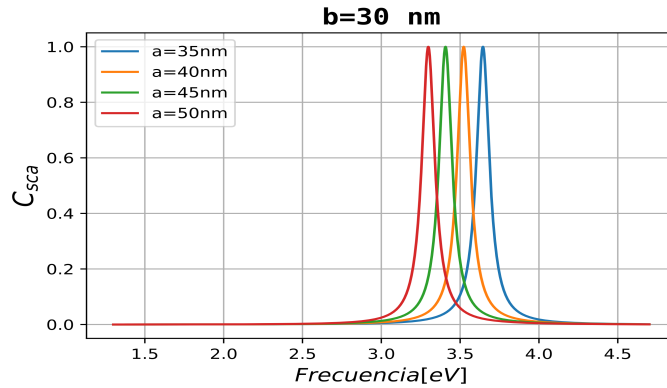


Figura 3.13: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 30$ nm.

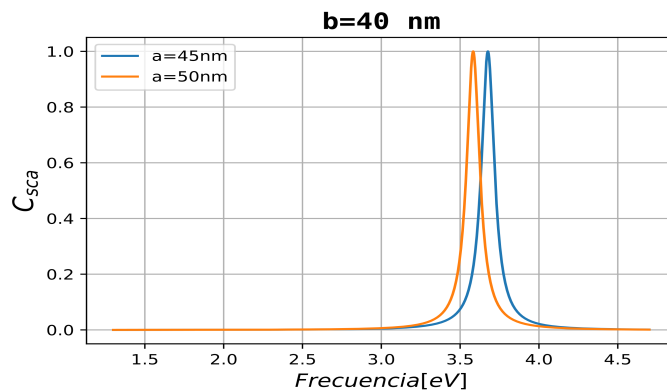


Figura 3.14: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 40$ nm.

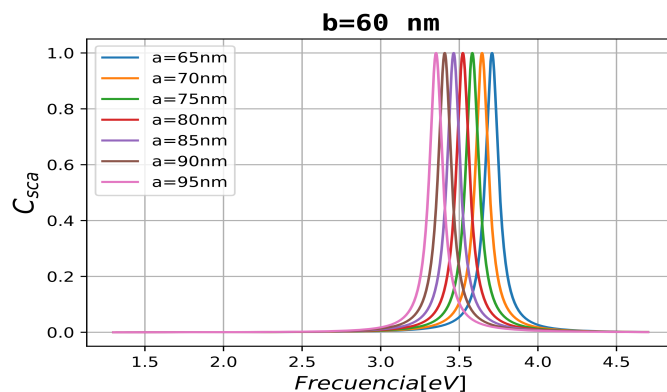


Figura 3.15: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esferoidales prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 60$ nm.

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE LSP EN NP 'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

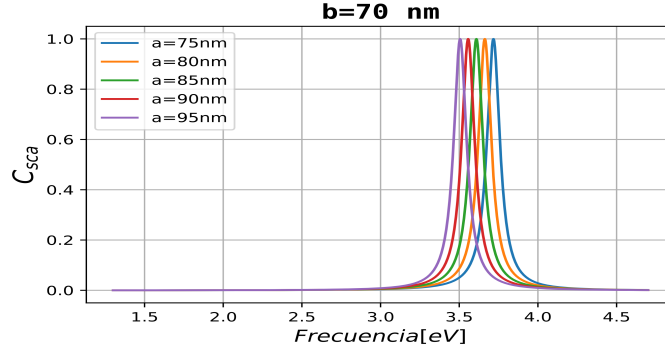


Figura 3.16: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 70 \text{ nm}$.

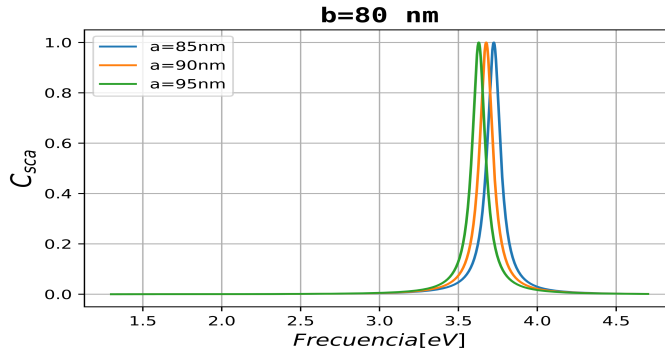


Figura 3.17: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 80 \text{ nm}$.

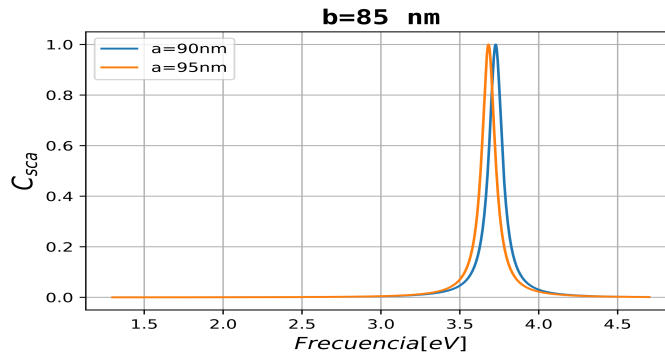


Figura 3.18: Coeficiente de esparcimiento de nanopartículas esféricas prolatas de plata de diferentes tamaños del semieje a con un valor del semieje $b = 85 \text{ nm}$.

La siguiente tabla muestra las frecuencias ω_{LSP} y longitudes de onda λ_{LSP} que generan el plasmón localizado de superficie en nanopartículas prolatas de plata para los casos mostrados en las figuras 3.11 a 3.18 cuando el campo se propaga a lo largo del eje z y está polarizado a lo largo del eje x . En la misma se muestran las longitudes de onda $\lambda_{LSP,exp}$ que generan el plasmón localizado tomando en cuenta los datos obtenidos por Johnson y Christy [21].

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE LSP EN NP 'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

| Esferoide prolata (Ag) | | | | |
|----------------------------|--------------|-------------------------|--------------------------|------------------------------|
| a [nm] | b [nm] | ω_{LSP} [eV] | λ_{LSP} [nm] | $\lambda_{LSP,exp}$ [nm] |
| 15 | 10 | 3.40 | 363.89 | 381.53 |
| 20 | 10 | 3.09 | 400.31 | 413.33 |
| 25 | 10 | 2.83 | 437.31 | 430.55 |
| 30 | 10 | 2.61 | 474.65 | 471.40 |
| 35 | 10 | 2.42 | 512.10 | 496.00 |
| 40 | 10 | 2.25 | 549.56 | 540.67 |
| 45 | 10 | 2.11 | 587.04 | 582.15 |
| 50 | 10 | 1.98 | 624.60 | 616.91 |
| 25 | 20 | 3.58 | 346.11 | 367.95 |
| 30 | 20 | 3.40 | 363.89 | 381.53 |
| 35 | 20 | 3.24 | 382.06 | 397.43 |
| 40 | 20 | 3.09 | 400.31 | 413.33 |
| 45 | 20 | 2.96 | 418.70 | 413.33 |
| 50 | 20 | 2.83 | 437.31 | 430.55 |
| 35 | 30 | 3.64 | 340.23 | 367.95 |
| 40 | 30 | 3.52 | 352.00 | 367.95 |
| 45 | 30 | 3.40 | 363.89 | 381.53 |
| 50 | 30 | 3.29 | 375.91 | 381.53 |
| 45 | 40 | 3.67 | 337.35 | 354.28 |
| 50 | 40 | 3.58 | 346.11 | 367.95 |
| 65 | 60 | 3.70 | 334.44 | 354.28 |
| 70 | 60 | 3.64 | 340.22 | 367.95 |
| 75 | 60 | 3.58 | 346.11 | 367.95 |
| 80 | 60 | 3.52 | 352.00 | 367.95 |
| 85 | 60 | 3.46 | 358.00 | 367.95 |
| 90 | 60 | 3.40 | 363.82 | 381.53 |
| 95 | 60 | 3.35 | 369.97 | 381.53 |
| 75 | 70 | 3.71 | 333.54 | 354.28 |
| 80 | 70 | 3.66 | 338.55 | 367.95 |
| 85 | 70 | 3.60 | 343.61 | 367.95 |
| 90 | 70 | 3.55 | 348.64 | 367.95 |
| 95 | 70 | 3.50 | 353.71 | 367.95 |
| 85 | 80 | 3.72 | 332.91 | 370.14 |
| 90 | 80 | 3.67 | 337.35 | 354.28 |
| 95 | 80 | 3.62 | 341.72 | 367.95 |
| 90 | 85 | 3.72 | 332.73 | 354.28 |
| 95 | 85 | 3.68 | 336.80 | 354.28 |

Tabla 3.3: Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas prolatas de plata.

La tabla 3.3 muestra un rango de longitudes de onda para generar el plasmón localizado de superficie comprendido entre 340 nm y 620 nm . Como se puede observar, cuando el semieje c se encuentra por encima de los 60 nm , la longitud de onda que genera el plasmón localizado de superficie entre una nanopartícula con un determinado valor de su semieje a y la consecuente cada vez está más cerca entre sí, esto es, si se analizan las gráficas 3.11 a 3.18 se puede observar que conforme aumenta el semieje c , el coeficiente de esparcimiento se corre hacia la derecha, donde en cada gráfica las curvas cada vez están más cerca una de la otra.

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE LSP EN NP 'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.2. GENERACIÓN DE LSP EN NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES EN FUNCIÓN DE
SU TAMAÑO

| Esferoide prolata (Au) | | | | |
|----------------------------|----------|---------------------|----------------------|--------------------------|
| a [nm] | b [nm] | ω_{LSP} [eV] | λ_{LSP} [nm] | $\lambda_{LSP,exp}$ [nm] |
| 15 | 10 | 2.49 | 497.93 | 521.00 |
| 20 | 10 | 2.36 | 524.99 | 521.00 |
| 25 | 10 | 2.23 | 553.59 | 548.67 |
| 30 | 10 | 2.12 | 583.37 | 548.67 |
| 35 | 10 | 2.01 | 614.08 | 548.67 |
| 40 | 10 | 1.92 | 645.61 | 548.67 |
| 45 | 10 | 1.82 | 677.71 | 582.15 |
| 50 | 10 | 1.74 | 710.22 | 582.15 |
| 25 | 20 | 2.55 | 485.09 | 521.00 |
| 30 | 20 | 2.49 | 497.93 | 521.00 |
| 35 | 20 | 2.42 | 511.19 | 521.00 |
| 40 | 20 | 2.36 | 524.99 | 521.00 |
| 45 | 20 | 2.30 | 539.06 | 521.00 |
| 50 | 20 | 2.23 | 553.59 | 521.00 |
| 35 | 30 | 2.57 | 481.01 | 521.00 |
| 40 | 30 | 2.53 | 489.32 | 521.00 |
| 45 | 30 | 2.49 | 497.93 | 521.00 |
| 50 | 30 | 2.44 | 506.75 | 521.00 |
| 45 | 40 | 2.58 | 478.96 | 521.00 |
| 50 | 40 | 2.55 | 485.09 | 521.00 |
| 65 | 60 | 2.59 | 476.92 | 521.00 |
| 70 | 60 | 2.57 | 481.01 | 521.00 |
| 75 | 60 | 2.55 | 485.09 | 521.00 |
| 80 | 60 | 2.53 | 489.32 | 521.00 |
| 85 | 60 | 2.51 | 493.63 | 521.00 |
| 90 | 60 | 2.49 | 497.93 | 521.00 |
| 95 | 60 | 2.46 | 502.30 | 521.00 |
| 75 | 70 | 2.60 | 476.30 | 521.00 |
| 80 | 70 | 2.58 | 479.83 | 521.00 |
| 85 | 70 | 2.56 | 483.32 | 521.00 |
| 90 | 70 | 2.54 | 486.95 | 521.00 |
| 95 | 70 | 2.52 | 490.56 | 521.00 |
| 85 | 80 | 2.60 | 475.91 | 521.00 |
| 90 | 80 | 2.58 | 478.96 | 521.00 |
| 95 | 80 | 2.57 | 482.05 | 521.00 |
| 90 | 85 | 2.60 | 475.76 | 521.00 |
| 95 | 85 | 2.59 | 478.57 | 521.00 |

Tabla 3.4: Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas prolatas de oro.

Las Tablas 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4 muestran un comportamiento similar cuando el semieje c (para el caso de nanopartículas oblatas) y b (para el caso de nanopartículas prolatas) aumenta, esto es, las gráficas mostradas en las figuras 3.3 a 3.10 y 3.11 a 3.18 indican que hay un corrimiento del coeficiente de esparcimiento hacia la derecha cuando se aumenta la medida de alguno de los dos semiejes, los rangos entre cada una de las tablas es diferente debido al valor de la integral L_1 , para esferoides metálicas de la misma composición química, si se cumple la igualdad $b = c$ y el semieje a se mantiene fijo, entonces, la longitud de onda que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas prolatas será mayor que la longitud de onda que genere el plasmón localizado de

superficie en nanopartículas oblatas.

3.3. Generación de *LSP* en diversas configuraciones

Los resultados mostrados anteriormente se obtuvieron para una configuración en la que el campo eléctrico externo está polarizado linealmente al semieje paralelo al eje x del plano cartesiano que describe a las nanopartículas esféricas, un caso más general es suponer que el campo eléctrico está polarizado linealmente a lo largo de un plano formado por los dos semiejes diferentes del esferoide. No es necesario que el campo tenga una componente en cada semieje de la nanopartícula, ya que en dos de ellos el plasmón localizado de superficie se generará en la misma frecuencia. Para determinar la generación del plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas y prolatas es conveniente emplear un nuevo sistema de coordenadas que permita describir de manera más eficiente el campo eléctrico incidente. El método más conveniente para realizarlo es considerar una rotación del plano que se forma por los ejes del plano cartesiano que son paralelos a los dos semiejes diferentes de las nanopartículas.

3.3.1. Nanopartículas Oblatas

Se comienza el estudio para el caso de nanopartículas oblatas. La siguiente figura muestra la configuración que se analiza para determinar la generación de plasmones localizados de superficie. Para determinar el coeficiente de esparcimiento se considera un nuevo sistema de referencia x', y, z' con la propiedad de que alguno de los ejes del plano $x' - z'$ sea paralelo al vector de campo eléctrico incidente \mathbf{E}_0 .

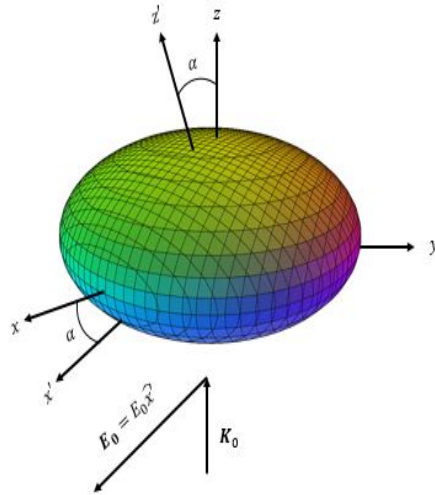


Figura 3.19: Esferoide oblato iluminado por un campo eléctrico \mathbf{E}_0 que se encuentra polarizado linealmente en el eje x' , con su vector de onda \mathbf{K}'_0 paralelo al eje z' .

Las siguientes gráficas muestran la generación de *LSP* empleando la configuración de la figura 3.19, se han seleccionado las medidas para las nanopartículas correspondientes a los datos empleados para las subsecciones 3.2.1 y 3.2.2.

CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP'S* ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

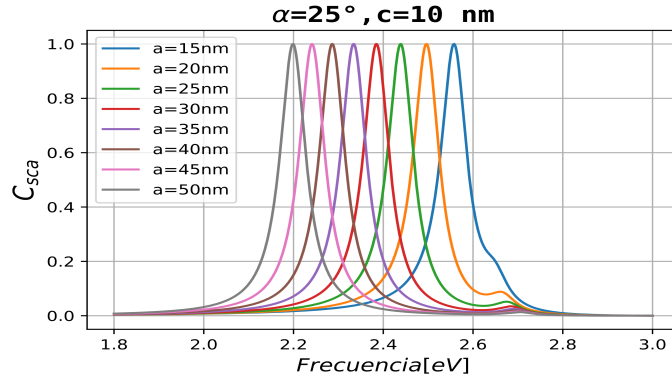


Figura 3.20: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 25$ respecto al eje x .

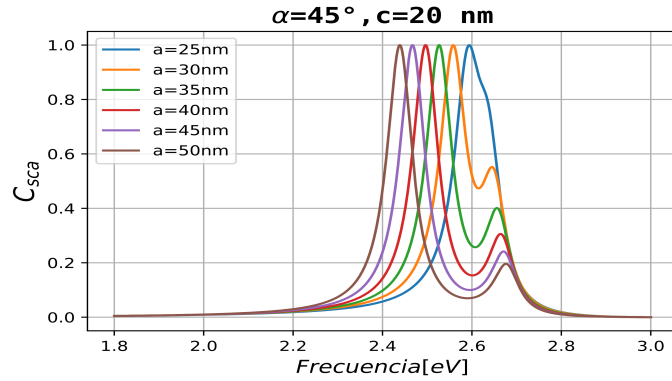


Figura 3.21: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 45$ respecto al eje x .

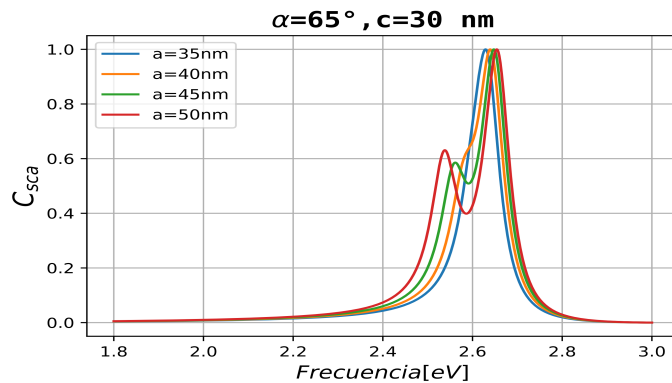


Figura 3.22: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 65$ respecto al eje x .

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

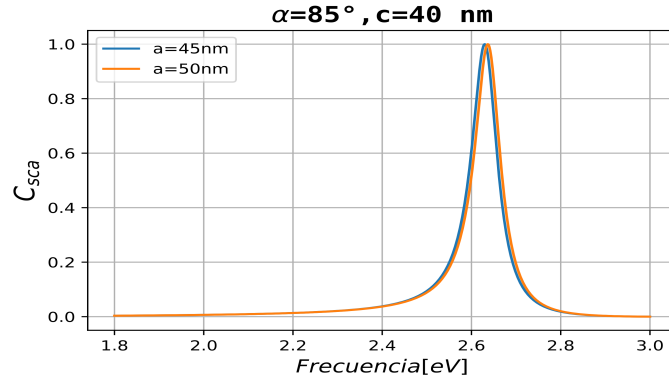


Figura 3.23: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 85$ respecto al eje x .

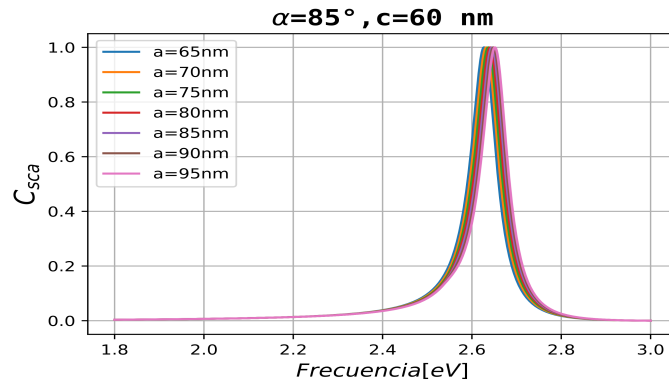


Figura 3.24: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 85$ respecto al eje x .

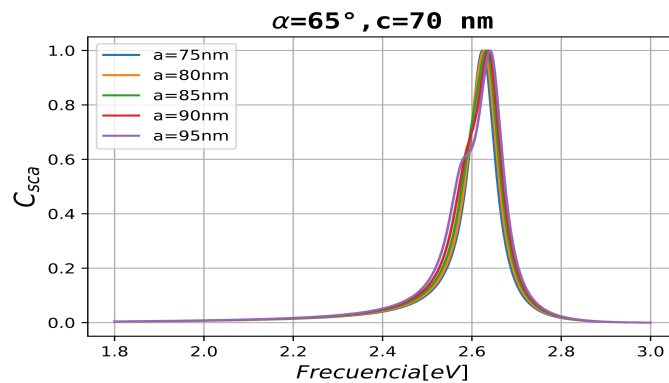


Figura 3.25: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 65$ respecto al eje x .

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE LSP EN NP 'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.3. GENERACIÓN DE LSP EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

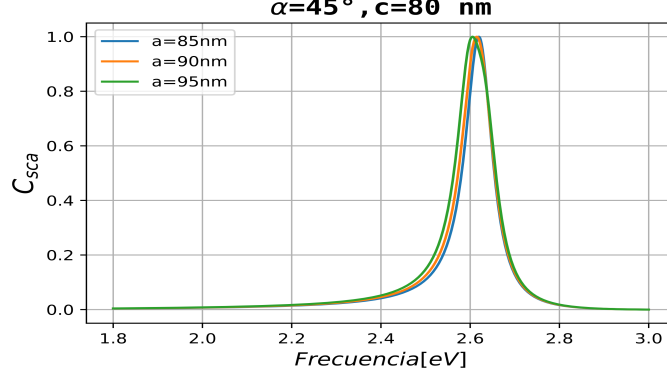


Figura 3.26: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 45$ respecto al eje x .

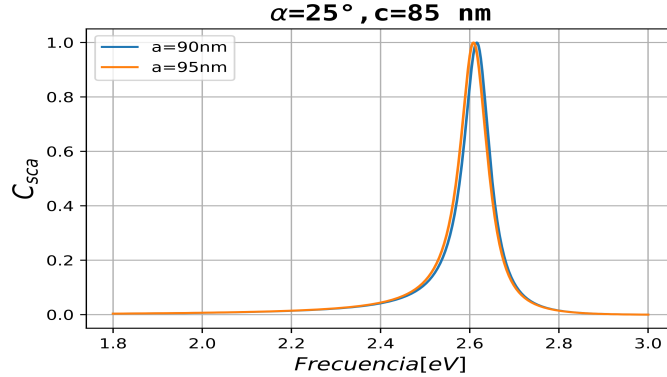


Figura 3.27: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas oblatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 25$ respecto al eje x .

El propósito de seleccionar la configuración mostrada en la figura 3.19 es el campo eléctrico incidente puede tener una componente a lo largo de cada semieje distinto de la nanopartícula oblata, de ese modo se pueden generar dos plasmones localizados de superficie. Cada frecuencia de generación estará determinada por el valor de la integral L_i . Las figuras 3.20 a 3.27 muestran las siguientes propiedades:

- La frecuencia de los dos máximos mostrados en el coeficiente de esparcimiento corresponde a las frecuencias que generan el plasmón localizado de superficie.
- No se pueden generar ambos plasmones al mismo tiempo, ya que las frecuencias que lo excitan son distintas.
- Dependiendo del ángulo α de la figura 3.19 se presentará con mayor intensidad un plasmón respecto al otro, esto es, si $\alpha = 0$, entonces, la polarización del campo eléctrico incidente está a lo largo del eje x y se excitaría solo un plasmón a una longitud de onda $\lambda_{LSP,x}$. si $\alpha = 90$, entonces, la polarización del campo eléctrico incidente está a lo largo del eje z y se excitaría solo un plasmón a una longitud de onda $\lambda_{LSP,z}$.
- Conform el semieje c de las nanopartículas va aumentando su tamaño, ambos máximos del coeficiente de esparcimiento se comienzan a acercar, el primero (Correspondiente a la menor

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

frecuencia) se desplaza hacia la derecha y el segundo (correspondiente a la frecuencia mayor) se desplaza hacia la izquierda.

La siguiente tabla muestra las longitudes de onda que generan plasmones localizados de superficie empleando la configuración de la figura 3.19.

| Esferoide oblata (<i>Au</i>) | | | | |
|--------------------------------|---------------|------------------------|------------------------|----------------------|
| <i>a</i> [nm] | <i>c</i> [nm] | $\lambda_{LSP,x}$ [nm] | $\lambda_{LSP,z}$ [nm] | $\Delta\lambda$ [nm] |
| 15 | 10 | 484.86 | 468.27 | 16.59 |
| 20 | 10 | 496.76 | 465.32 | 31.44 |
| 25 | 10 | 508.49 | 463.28 | 45.41 |
| 30 | 10 | 520.01 | 461.78 | 58.23 |
| 35 | 10 | 531.31 | 460.70 | 70.61 |
| 40 | 10 | 542.40 | 459.78 | 82.62 |
| 45 | 10 | 553.29 | 459.11 | 94.18 |
| 50 | 10 | 563.94 | 458.50 | 105.44 |
| 25 | 20 | 478.91 | 470.30 | 8.6 |
| 30 | 20 | 484.86 | 468.27 | 16.59 |
| 35 | 20 | 490.80 | 466.73 | 24.07 |
| 40 | 20 | 496.76 | 465.32 | 31.44 |
| 45 | 20 | 502.62 | 464.22 | 38.4 |
| 50 | 20 | 508.49 | 463.28 | 45.21 |
| 35 | 30 | 476.86 | 471.10 | 5.76 |
| 40 | 30 | 480.86 | 469.55 | 11.31 |
| 45 | 30 | 484.86 | 468.27 | 16.59 |
| 50 | 30 | 488.82 | 467.11 | 21.71 |
| 45 | 40 | 475.87 | 471.53 | 4.34 |
| 50 | 40 | 478.91 | 470.30 | 8.61 |
| 65 | 60 | 474.89 | 471.96 | 2.93 |
| 70 | 60 | 476.86 | 471.10 | 5.76 |
| 75 | 60 | 478.91 | 470.30 | 8.61 |
| 80 | 60 | 480.86 | 469.55 | 11.31 |
| 85 | 60 | 482.88 | 468.86 | 14.02 |
| 90 | 60 | 484.86 | 468.27 | 16.59 |
| 95 | 60 | 486.86 | 467.69 | 19.17 |
| 75 | 70 | 474.62 | 472.07 | 2.55 |
| 80 | 70 | 476.31 | 471.32 | 4.99 |
| 85 | 70 | 478.02 | 470.62 | 7.40 |
| 90 | 70 | 479.74 | 469.98 | 9.76 |
| 95 | 70 | 481.42 | 469.33 | 12.09 |
| 85 | 80 | 474.40 | 472.18 | 2.22 |
| 90 | 80 | 475.87 | 471.53 | 4.34 |
| 95 | 80 | 477.41 | 470.89 | 6.52 |
| 90 | 85 | 474.29 | 472.23 | 2.06 |
| 95 | 85 | 475.71 | 471.58 | 4.13 |

Tabla 3.5: Longitud de onda teórica y experimental que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de oro.

La tabla 3.5 no contiene información acerca del ángulo α , eso se debe a que dicho ángulo no altera la longitud de onda a la que se genera el plasmón localizado de superficie y funciona solo como un modulador del coeficiente de espaciamiento. Por tal motivo el máximo absoluto en las

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

figuras 3.20 a 3.27 a veces está de lado derecho de la gráfica y otras en el lado contrario. Compárese figura 3.21 y 3.22.

3.3.2. Nanopartículas Prolatas

Un análisis similar al del apartado 3.3.1 se realiza para nanopartículas prolatas de oro. La siguiente figura muestra la configuración para una nanopartícula prolata donde el campo eléctrico externo está polarizado linealmente sobre un plano formado por los dos semiejes que tienen valores distintos.

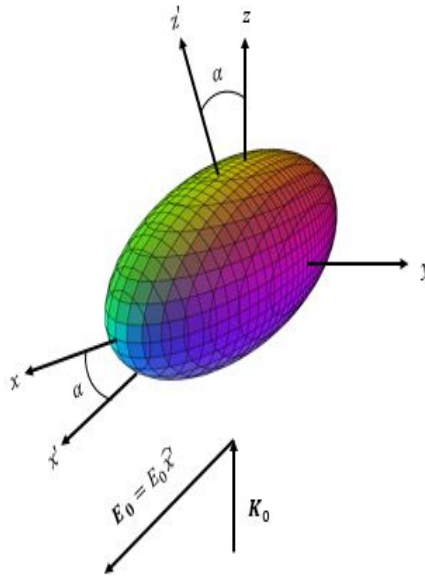


Figura 3.28: Esferoide prolata iluminada por un campo eléctrico \mathbf{E}_0 que se encuentra polarizado linealmente en el eje x' , con su vector de onda \mathbf{K}'_0 paralelo al eje z' .

Las siguientes gráficas muestran el coeficiente de esparcimiento para la configuración de la Figura 3.28 tomando distintos valores del ángulo α .

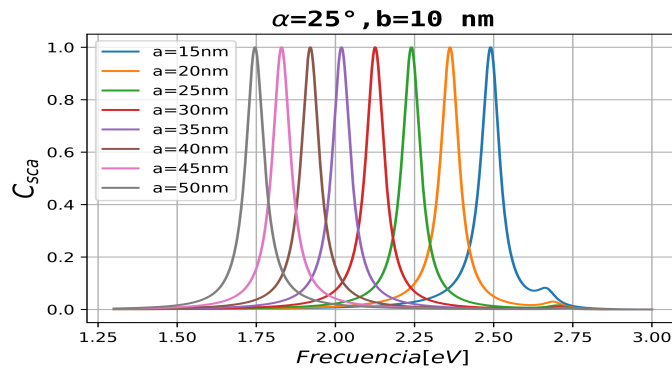


Figura 3.29: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 25$ respecto al eje x .

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP*'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

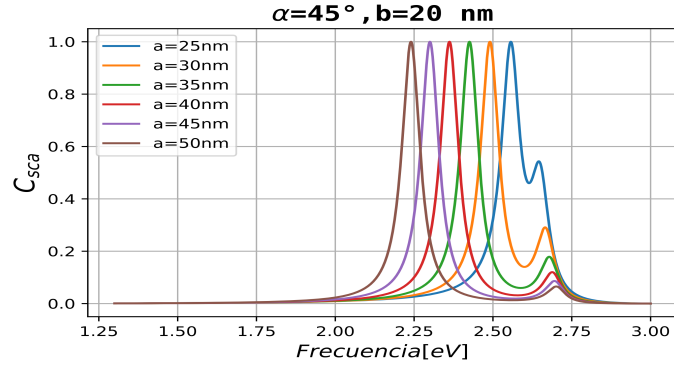


Figura 3.30: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 45$ respecto al eje x .

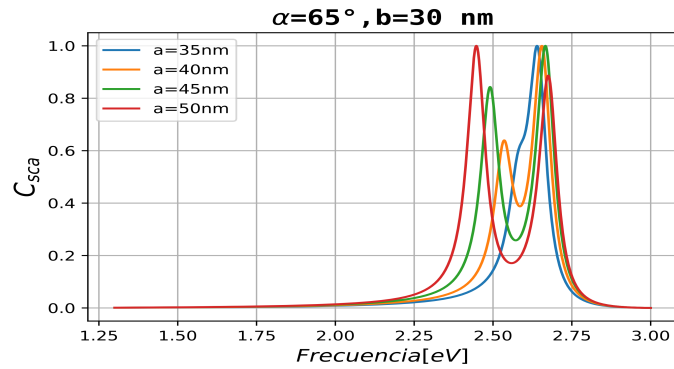


Figura 3.31: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 65$ respecto al eje x .

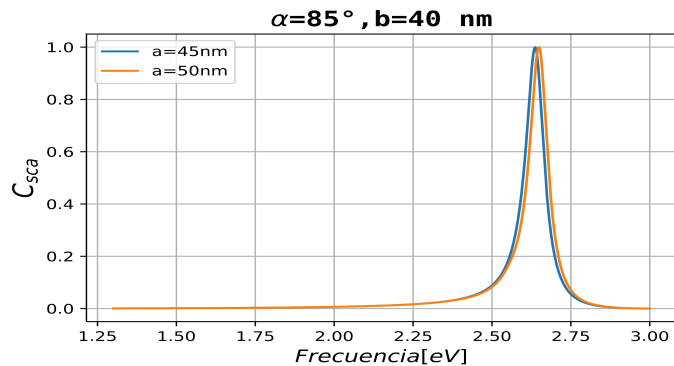


Figura 3.32: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 85$ respecto al eje x .

CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP'S* ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

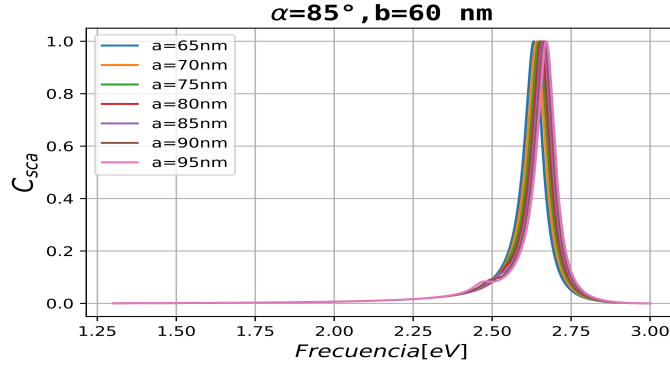


Figura 3.33: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 85$ respecto al eje x .

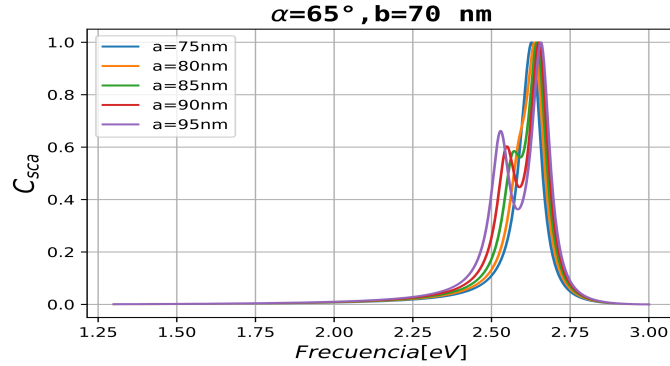


Figura 3.34: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 65$ respecto al eje x .

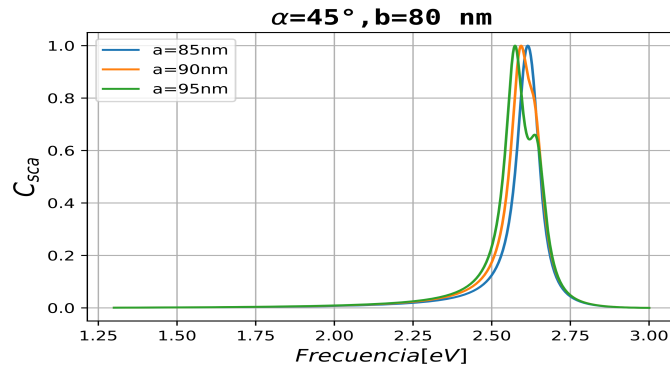


Figura 3.35: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 45$ respecto al eje x .

**CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE LSP EN NP 'S
ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN**
3.3. GENERACIÓN DE LSP EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

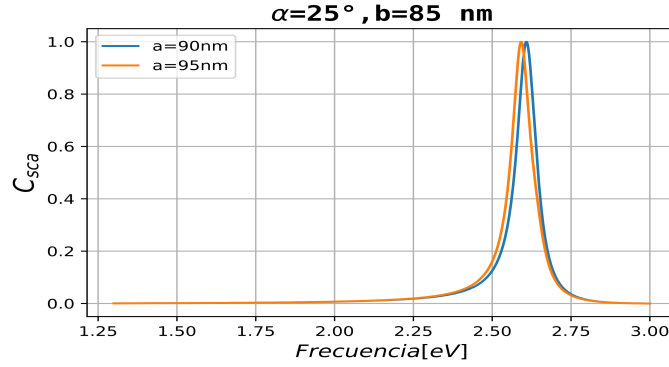


Figura 3.36: Coeficiente de esparcimiento para nanopartículas esféricas prolatas de oro iluminadas con un campo eléctrico $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{x}'$ donde \hat{x}' forma un ángulo $\alpha = 25$ respecto al eje x .

Las gráficas mostradas en las figuras 3.29 a 3.36 muestran las mismas propiedades a las expuestas en la sección 3.3.1 de las gráficas 3.20 a 3.27.

En la siguiente página se muestra la tabla que contiene las longitudes de onda que generan plasmones localizados de superficie correspondiente a las figuras 3.20 a 3.27. La longitud de onda $\lambda_{LSP,x}$ es la longitud que excita el plasmón localizado de superficie por la presencia de una componente del campo eléctrico incidente paralela al eje x , la longitud de onda $\lambda_{LSP,z}$ es la longitud que excita el plasmón localizado de superficie por la presencia de una componente del campo eléctrico incidente paralela al eje z . El término $\Delta\lambda$ representa el valor absoluto entre la resta de $\lambda_{LSP,x}$ y $\lambda_{LSP,z}$, dicho término sirve para ver cómo se van acercando las frecuencias que generan LSP cuando se va aumentando el tamaño del semieje b .

CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP'S* ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

| Esferoide prolata (<i>Au</i>) | | | | |
|---------------------------------|---------------|------------------------|------------------------|----------------------|
| <i>a</i> [nm] | <i>b</i> [nm] | $\lambda_{LSP,x}$ [nm] | $\lambda_{LSP,z}$ [nm] | $\Delta\lambda$ [nm] |
| 15 | 10 | 497.93 | 465.06 | 32.87 |
| 20 | 10 | 524.99 | 461.24 | 63.75 |
| 25 | 10 | 553.59 | 459.06 | 94.53 |
| 30 | 10 | 583.37 | 457.69 | 125.68 |
| 35 | 10 | 614.08 | 456.69 | 157.39 |
| 40 | 10 | 645.61 | 456.04 | 189.57 |
| 45 | 10 | 677.71 | 455.49 | 222.12 |
| 50 | 10 | 710.22 | 455.12 | 255.1 |
| 25 | 20 | 485.09 | 468.20 | 16.89 |
| 30 | 20 | 497.93 | 465.06 | 32.87 |
| 35 | 20 | 511.19 | 462.85 | 48.34 |
| 40 | 20 | 524.97 | 461.24 | 63.73 |
| 45 | 20 | 539.06 | 460.07 | 78.99 |
| 50 | 20 | 553.59 | 459.06 | 94.53 |
| 35 | 30 | 481.01 | 469.55 | 11.46 |
| 40 | 30 | 489.32 | 467.00 | 22.32 |
| 45 | 30 | 493.93 | 465.06 | 28.87 |
| 50 | 30 | 506.75 | 463.51 | 43.24 |
| 45 | 40 | 478.96 | 470.23 | 8.73 |
| 50 | 40 | 485.09 | 468.20 | 16.89 |
| 65 | 60 | 476.92 | 471.07 | 5.85 |
| 70 | 60 | 481.01 | 469.55 | 11.46 |
| 75 | 60 | 485.09 | 468.20 | 16.89 |
| 80 | 60 | 489.32 | 467.00 | 22.32 |
| 85 | 60 | 493.63 | 465.95 | 27.68 |
| 90 | 60 | 497.93 | 465.06 | 32.57 |
| 95 | 60 | 502.30 | 464.25 | 38.05 |
| 75 | 70 | 476.30 | 471.30 | 5.00 |
| 80 | 70 | 479.30 | 469.93 | 9.37 |
| 85 | 70 | 483.32 | 468.72 | 14.6 |
| 90 | 70 | 486.95 | 467.67 | 19.28 |
| 95 | 70 | 490.53 | 466.70 | 23.83 |
| 85 | 80 | 475.91 | 471.53 | 4.38 |
| 90 | 80 | 478.96 | 470.23 | 8.73 |
| 95 | 80 | 482.05 | 469.17 | 12.88 |
| 90 | 85 | 475.76 | 471.60 | 4.16 |
| 95 | 85 | 478.57 | 470.39 | 8.18 |

Tabla 3.6: Longitud de onda teórica que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas prolatas de oro.

Respecto a la tabla 3.5, el rango de longitudes de onda que generan el plasmón localizado de superficie para nanopartículas oblatas de oro debido a la presencia de una componente del campo eléctrico incidente a lo largo del eje x va de los 470 nm a los 570 nm , el rango de longitudes de onda que generan el plasmón localizado de superficie para nanopartículas oblatas debido a la presencia de una componente del campo eléctrico incidente a lo largo del eje z va de los 450 nm a los 470 nm .

Analizando la tabla 3.6, el rango de longitudes de onda que generan el plasmón localizado de superficie para nanopartículas prolatas de oro debido a la presencia de una componente del campo

CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP'S* ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

eléctrico incidente a lo largo del eje x va de los 470 nm a los 710 nm , el rango de longitudes de onda que generan el plasmón localizado de superficie para nanopartículas oblatas debido a la presencia de una componente del campo eléctrico incidente a lo largo del eje z va de los 450 nm a los 470 nm .

3.3.3. *LSP* en nanopartículas elipsoidales inmersas en diversos dieléctricos

A lo largo de las subsecciones del capítulo 3 se mostraron los efectos que tiene el tamaño de las nanopartículas en la generación del plasmón localizado de superficie, así como los resultados de su generación cuando se estudia la posición de la partícula respecto al campo eléctrico incidente \mathbf{E}_0 . El último punto a tratar en el capítulo presente es la influencia que tiene el medio dieléctrico en el cuál se encuentra inmersa la partícula esferoidal para generar *LSP*. En la práctica, es de gran ayuda hacer un estudio teórico sobre la generación de *LSP* suponiendo que las nanopartículas están inmersas en un dieléctrico diferente del aire, eso ayuda a saber que longitudes de onda o frecuencias son necesarias para iluminarlas y así generar la resonancia plasmónica localizada con el material existente en el laboratorio.

La siguiente tabla muestra las longitudes de onda de iluminación que generan el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de plata inmersas en aire ($\epsilon_a = 1,006$), aceite mineral ($\epsilon_{ac} = 2,56$) y vidrio pyrex ($\epsilon_{VP} = 5,6$). La configuración es la misma que la empleada en la sección 3.2.1. Para poder realizar una comparativa con los datos mostrados en las subsecciones anteriores se han seleccionado algunas medidas para las nanopartículas empleadas en las secciones precedentes.

La siguiente tabla muestra las frecuencias que generan el plasmón localizado de superficie en los 3 medios dieléctricos diferentes para nanopartículas oblatas de plata.

| Esferoide oblata (<i>Ag</i>) | | | | |
|--------------------------------|--------------|--|--|---|
| a [nm] | c [nm] | λ_{LSP} [nm] (ϵ_{ac}) | λ_{LSP} [nm] (ϵ_{VP}) | λ_{LSP} [nm] (ϵ_a) |
| 15 | 10 | 425.11 | 588.71 | 345.72 |
| 20 | 10 | 455.02 | 642.07 | 362.29 |
| 25 | 10 | 483.28 | 691.59 | 378.34 |
| 30 | 10 | 510.12 | 737.69 | 393.75 |
| 35 | 10 | 535.72 | 781.64 | 408.65 |
| 40 | 10 | 560.06 | 823.44 | 423.05 |
| 45 | 10 | 583.50 | 863.59 | 436.94 |
| 50 | 10 | 606.08 | 900.93 | 450.44 |
| 25 | 20 | 409.56 | 560.31 | 337.22 |
| 30 | 20 | 425.11 | 588.71 | 345.72 |
| 35 | 20 | 440.29 | 615.84 | 354.12 |
| 40 | 20 | 455.02 | 642.07 | 362.29 |
| 45 | 20 | 469.32 | 666.85 | 370.41 |
| 50 | 20 | 483.28 | 691.59 | 378.34 |
| 35 | 30 | 404.24 | 550.72 | 334.39 |
| 40 | 30 | 414.74 | 569.77 | 340.09 |
| 45 | 30 | 425.11 | 588.71 | 345.72 |
| 50 | 30 | 435.28 | 606.87 | 351.34 |
| 45 | 40 | 401.59 | 545.63 | 332.94 |
| 50 | 40 | 409.56 | 560.31 | 337.22 |

Tabla 3.7: Longitud de onda teórica que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de plata.

CAPÍTULO 3. EFECTOS EN LA GENERACIÓN DE *LSP* EN *NP'S* ESFEROIDALES DEBIDO A SU TAMAÑO, COMPOSICIÓN Y ORIENTACIÓN
3.3. GENERACIÓN DE *LSP* EN DIVERSAS CONFIGURACIONES

Los resultados mostrados en la tabla 3.7 indican que para una misma medida de nanopartícula, el plasmón localizado de superficie se excita a una longitud de onda mayor cuando está inmersa en vidrio pyrex en comparación a cuando se encuentra inmersa en aceite mineral. La longitud de onda que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de plata inmersas en aire es la menor en comparación a las dos restantes (cuando están inmersas en vidrio pyrex y aceite minera).

La siguiente tabla muestra las longitudes de onda de iluminación que generan el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de oro inmersas en aire ($\epsilon_a = 1,006$), aceite mineral ($\epsilon_{ac} = 2,56$) y vidrio pyrex ($\epsilon_{VP} = 5,6$). La configuración es la misma que la empleada en la sección 3.2.2. Para poder realizar una comparativa con los datos mostrados en las subsecciones anteriores se han seleccionado algunas medidas para las nanopartículas empleadas en las secciones precedentes.

La siguiente tabla muestra las frecuencias que generan el plasmón localizado de superficie en los 3 medios dieléctricos diferentes para nanopartículas oblatas de oro.

| Esferoide oblata (<i>Au</i>) | | | | |
|--------------------------------|---------------|--|---|---------------------------------------|
| <i>a</i> [nm] | <i>c</i> [nm] | λ_{LSP} [nm] (ϵ_{ac}) | λ_{VP} [nm] (ϵ_{VP}) | λ_{LSP} [nm] (ϵ_a) |
| 15 | 10 | 543.97 | 678.81 | 484.86 |
| 20 | 10 | 567.50 | 725.49 | 497.76 |
| 25 | 10 | 590.37 | 769.63 | 508.49 |
| 30 | 10 | 612.41 | 811.71 | 520.01 |
| 35 | 10 | 633.83 | 851.58 | 531.31 |
| 40 | 10 | 654.51 | 889.78 | 542.40 |
| 45 | 10 | 674.60 | 926.69 | 553.29 |
| 50 | 10 | 688.88 | 961.93 | 563.94 |
| 25 | 20 | 531.93 | 654.21 | 478.91 |
| 30 | 20 | 543.97 | 678.81 | 484.86 |
| 35 | 20 | 555.82 | 702.47 | 490.80 |
| 40 | 20 | 567.50 | 725.49 | 496.76 |
| 45 | 20 | 579.03 | 747.81 | 502.62 |
| 50 | 20 | 590.37 | 769.63 | 508.49 |
| 35 | 30 | 527.92 | 646.42 | 476.86 |
| 40 | 30 | 535.93 | 662.84 | 480.86 |
| 45 | 30 | 543.97 | 678.81 | 484.86 |
| 50 | 30 | 551.89 | 694.79 | 488.82 |
| 45 | 40 | 525.83 | 642.24 | 475.87 |
| 50 | 40 | 531.93 | 652.62 | 478.91 |

Tabla 3.8: Longitud de onda teórica que genera el plasmón localizado de superficie en nanopartículas oblatas de oro.

La tabla 3.8 muestra un comportamiento igual al de la tabla 3.7, la diferencia es que la longitud de onda que genera el plasmón localizado de superficie se desplaza hacia la derecha en comparación con los datos reportados en la tabla 3.7, esto se debe al material empleado.

Capítulo 4

Conclusiones y trabajo futuro

En este trabajo se realizó una caracterización de los parámetros necesarios para generar plasmones localizados de superficie en nanopartículas elipsoidales de oro y plata, centralizando el mismo en el estudio detallado que permite soluciones analíticas para determinar las frecuencias que generan el *PLS*, esto es, para elipsoides oblatas y prolatas.

Los tamaños de nanopartículas que se presentan a lo largo de este proyecto de tesis se eligieron después de analizar artículos de investigación en los que se emplean los mismos para generar plasmones localizados de superficie en nanopartículas esféricas. Las medidas de las nanopartículas oblatas de plata presentadas a lo largo de la sección tres muestran que la generación del plasmón localizado de superficie se da en la rango de longitudes de onda entre 300 nm y 450 nm , para nanopartículas oblatas de oro la región está entre 470 nm y 570 nm , por otro lado, para nanopartículas prolatas de plata, las longitudes de onda que generan *LSP* se encuentran en el rango entre los 340 nm y 620 nm , mientras que para el oro se encuentran entre 470 nm y 710 nm (Región del espectro electromagnético donde el modelo de *Drude* tiene mayor precisión en comparación a la región comprendida entre el ultravioleta cercano y el ultravioleta lejano), esto es, dentro de la región visible del espectro electromagnético. Los datos mostrados para una nanopartícula esférica de plata muestran que la frecuencia que genera el plasmón localizado de superficie siempre es la misma sin importar si el radio de ésta es diferente, en la práctica no es así. La limitación anterior para el caso de las esferas es una consecuencia del desarrollo teórico de las integrales L_i , ya que una de las condiciones impuestas a lo largo del capítulo 2 es que los semiejes de los elipsoides deben cumplir con $a > b > c$.

El valor del ancho de banda a la mitad del máximo en las gráficas de la sección 3 depende únicamente de la composición química de las nanopartículas esferoidales y no de las dimensiones de las mismas o del dieléctrico en el que se encuentren inmersas. No es posible calcular el ancho de banda para los casos en los que se generan dos plasmones localizados de superficie en elipsoides oblatas y prolatas de oro y plata, la razón principal es que conforme aumentan de tamaño los semiejes, las longitudes de onda que generan *LSP* se acercan cada vez más, de tal manera que la distancia entre ellas es menor en comparación al ancho de banda cuando se genera un sólo plasmón.

De manera general, para nanopartículas oblatas y prolatas de oro y plata la generación del plasmón localizado de superficie se da en frecuencias menores a 4 eV , y mayores a 2 eV por lo que la comparativa que se hace empleando los datos experimentales del índice complejo provenientes del artículo de Johnson and Christy [21] es adecuada, ya que en ese rango el modelo de Drude describe adecuadamente el valor de la función dieléctrica.

Las tablas expuestas en la última subsección del capítulo 3 muestran que si los esferoides de oro y plata se encuentran inmersos en dos dieléctricos cuyas permitividades son ϵ_1 , ϵ_2 , y la relación

CAPÍTULO 4. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

de orden entre ellos es $\epsilon_1 < \epsilon_2$, entonces $\lambda_{LSP,1} < \lambda_{LSP,2}$, donde $\lambda_{LSP,1}$ es la frecuencia que genera el plasmón localizado de superficie en el esferoide inmerso en el dieléctrico cuya permitividad es ϵ_1 y $\lambda_{LSP,2}$ es la frecuencia que genera el plasmón localizado de superficie en el esferoide inmerso en el dieléctrico cuya permitividad es ϵ_2 .

Como trabajo a futuro, queda realizar simulaciones virtuales y experimentos con la finalidad de comprobar los resultados mostrados a lo largo de este trabajo, además de realizar estudios avanzados para realizar cálculos numéricos en nanopartículas elipsoidales cuya solución analítica no es posible.

Apéndice A

Solución a las integrales L_1 para nanopartículas esferoidales

A.1. Nanopartículas oblatas

Consideremos la ecuación (2.62) del capítulo 2 correspondiente al factor L_1 para una nanopartícula oblata, esto es, se cumple la relación de orden $a = b > c$.

$$L_1 = \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)^2 \sqrt{c^2 + q}}. \quad (\text{A.1})$$

Empleando el siguiente cambio de variable:

$$u = \sqrt{q + c^2}, \quad \Rightarrow \quad du = \frac{1}{2\sqrt{q + c^2}} dq, \quad \Rightarrow \quad dq = 2\sqrt{q + c^2} du.$$

La integral de la ecuación (A.1) se puede expresar de la siguiente manera:

$$L_1 = \int \frac{du}{(u^2 + a^2 - c^2)^2}, \quad (\text{A.2})$$

donde se han omitido los límites de integración para resolverla de manera indefinida. Tomando en cuenta la siguiente fórmula de reducción se puede encontrar una solución a la ecuación (A.2):

$$\int \frac{du}{(ku^2 + p)^n} = \frac{2n - 3}{2p(n - 1)} \int \frac{du}{(ku^2 + p)^{n-1}} + \frac{u}{2p(n - 1)(ku^2 + p)^{n-1}}.$$

Los valores p y k son constantes. Para el caso de la ecuación (A.2) los valores adecuados son $k = 1$, $p = a^2 - c^2$ y $n = 2$, de modo que el factor L_1 se puede expresar de la siguiente manera:

$$L_1 = \frac{u}{2(a^2 - c^2)(u^2 + a^2 - c^2)} + \frac{1}{2(a^2 - c^2)} \int \frac{du}{u^2 + a^2 - c^2}. \quad (\text{A.3})$$

La integral que aparece en la ecuación (A.3) es una integral conocida considerando que $a^2 - c^2 > 0$, dicha solución se expresa mediante la siguiente ecuación:

$$\int \frac{du}{u^2 + a^2 - c^2} = \frac{\arctg\left(\frac{u}{\sqrt{a^2 - c^2}}\right)}{\sqrt{a^2 - c^2}}.$$

**APÉNDICE A. SOLUCIÓN A LAS INTEGRALES L_1 PARA
NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES
A.2. NANOPARTÍCULAS PROLATAS**

Con el resultado anterior, se encuentra una primitiva a la integral de la ecuación (A.3):

$$\int \frac{du}{(u^2 + a^2 - c^2)^2} = \frac{u}{2(a^2 - c^2)(u^2 + a^2 - c^2)} + \frac{\arctg\left(\frac{u}{\sqrt{a^2 - c^2}}\right)}{2(a^2 - c^2)^{3/2}}. \quad (\text{A.4})$$

Haciendo el cambio a las variables originales en la ecuación (A.4) se obtiene la solución al factor L_1 :

$$\int \frac{dq}{(a^2 + q)^2 \sqrt{c^2 + q}} = \left[\frac{\arctg\left(\frac{\sqrt{q+c^2}}{\sqrt{a^2-c^2}}\right)}{\sqrt{a^2-c^2}} + \frac{\sqrt{q+c^2}}{2(a^2-c^2)(q+a^2)} \right]. \quad (\text{A.5})$$

Al evaluar la ecuación (A.5) desde un valor $q = 0$ hasta $q = \infty$ se obtiene el valor de la integral:

$$L_1 = \frac{g(e)}{2e^2} \left[\frac{\pi}{2} - \arctan(g(e)) \right] - \frac{g^2(e)}{2}, \quad (\text{A.6})$$

donde e^2 y $g(e)$ se representan por las siguientes ecuaciones:

$$e^2 = 1 - \frac{c^2}{a^2}, \quad g(e) = \sqrt{\frac{1-e^2}{e^2}}. \quad (\text{A.7})$$

A.2. Nanopartículas prolatas

Consideremos la ecuación (2.64) del capítulo 2 correspondiente al factor L_1 para una nanopartícula prolata, esto es, se cumple la relación de orden $a > b = c$.

$$L_1 = \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)^{3/2}(c^2 + q)}. \quad (\text{A.8})$$

Para resolver la ecuación (A.8) se propone el siguiente cambio de variables:

$$u = \sqrt{q + a^2}, \quad \Rightarrow \quad du = \frac{1}{2\sqrt{q + a^2}} dx.$$

La integral de la ecuación (A.8) en términos de la variable u queda expresada de la siguiente manera:

$$\int \frac{dq}{(a^2 + q)^{3/2}(c^2 + q)} = 2 \int \frac{du}{u^2(u^2 - a^2 + c^2)}. \quad (\text{A.9})$$

En la ecuación (A.9) no se toman en cuenta los límites de integración, ya que al final del problema se regresará a las variables iniciales, la integral se puede resolver empleando fracciones parciales al colocar el término $u^2 - a^2 + c^2 = (u + \sqrt{a^2 - c^2})(u - \sqrt{a^2 - c^2})$:

$$\int \frac{du}{u^2(u^2 - a^2 + c^2)} = \frac{1}{a^2 - c^2} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{a^2 - c^2}} \int \frac{du}{u - \sqrt{a^2 - c^2}} - \frac{1}{2\sqrt{a^2 - c^2}} \int \frac{du}{u + \sqrt{a^2 - c^2}} - \int \frac{du}{u^2} \right\}. \quad (\text{A.10})$$

Cada una de las integrales que aparecen de lado derecho de la ecuación (A.10) tienen primitivas fáciles de encontrar [19], resolviéndolas se obtiene la siguiente simplificación

$$\int \frac{du}{u^2(u^2 - a^2 + c^2)} = \frac{1}{a^2 - c^2} \left[\frac{\ln(u - \sqrt{a^2 - c^2}) - \ln(u + \sqrt{a^2 - c^2})}{2\sqrt{a^2 - c^2}} - \frac{1}{u} \right],$$

**APÉNDICE A. SOLUCIÓN A LAS INTEGRALES L_1 PARA
NANOPARTÍCULAS ESFEROIDALES
A.2. NANOPARTÍCULAS PROLATAS**

$$\Rightarrow \int \frac{du}{u^2(u^2 - a^2 + c^2)} = \frac{1}{a^2 - c^2} \left[\frac{\ln \left(\frac{u - \sqrt{a^2 - c^2}}{u + \sqrt{a^2 - c^2}} \right)}{2\sqrt{a^2 - c^2}} - \frac{1}{u} \right].$$

Regresando a la variable original se obtiene la siguiente expresión para la integral L_1 :

$$\int \frac{dq}{(a^2 + q)^{3/2}(c^2 + q)} = \frac{2}{a^2 - c^2} \left[\frac{\ln \left(\frac{\sqrt{q+a^2} - \sqrt{a^2 - c^2}}{\sqrt{q+a^2} + \sqrt{a^2 - c^2}} \right)}{2\sqrt{a^2 - c^2}} - \frac{1}{\sqrt{q+a^2}} \right]. \quad (\text{A.11})$$

Aplicando los límites de la ecuación (A.8) se obtiene el valor para el factor L_1 :

$$L_1 = \frac{1 - e^2}{e^2} \left(-1 + \frac{1}{2e} \ln \left(\frac{1 + e}{1 - e} \right) \right), \quad (\text{A.12})$$

donde los valores para e^2 y $g(e)$ son los mismos que para una nanopartícula oblata.

Bibliografía

- [1] WILLIAMS, W. ROBERT. *On a Remarkable Case of Uneven Distribution of Light in a Diffraction Grating Spectrum*, Estados Unidos de América: University Johns Hopkins, Vol. 18, Issue 269. (1902).
- [2] STRUTT, R. WILLIAM. *On the Dinamical Theory of Gratings*, Londres: Royal Society, Vol. 79, Issue 532. (1907).
- [3] WILLIAMS, W. ROBERT. *Anomalous Diffraction Gratings*, Estados Unidos de América: University Johns Hopkins, PPhys. Rev. 48, 928. (1935).
- [4] FANO, UGO. *The Theory of Anomalous Diffraction Gratings and of Quasi-Stationary Waves on Metallic Surfaces (Sommerfeld's Waves)*, Estados Unidos de América: Carnegie Institution of Washington, J. Opt. Soc. Am. Vol. 31, Issue 3, pp. 213-222. (1941).
- [5] R., H. RITCHIE. *Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films*, Estados Unidos de América: Health Physics Division, Phys. Rev. 106, 874 (1957).
- [6] BOHM, DAVID Y PINES, DAVID. *A Collective Description of Electron Interactions*, Estados Unidos de América: princeton University, Phys. Rev. 85, 338 (1950).
- [7] WATANABE, H. *Electronic and Electron Physics*, Estados Unidos de América: Academic, New York, (1955).
- [8] OTTO, ANDREAS. *Excitation of Nonradiative Surface Plasma Waves in Silver by the Method of Frustrated Total Reflection*, Alemania: Sektion Physik der Universität München, Springer, Vol. 216, Issue 4. (1968).
- [9] KRETSCHMANN, ERICH Y REATHER, HEINZ. *Radiative Decay of Non Radiative Surface Plasmons Excited by Light*, Alemania: Institut für Angewandte Physik der Universität Hamburg, Springer, Vol. 217, Issue 3. (1968).
- [10] BURSTEIN, ELIAS ET ALL. *A New Theory of Wood's Anomalies on Optical Gratings*, Estados Unidos de América: Polytechnic Institute of Brooklyn, J. Opt. Soc. Am. Vol. 4, Issue 10, pp. 1275-1297. (1965).
- [11] EBBESEN, T., LEZEC, J. y THIO, T. *Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays*, Departament of physics: Massachusetts, Nature, Vol. 391, Issue 43, pp. 667-669. (1998).
- [12] JACKSON, W. DAVID. *Classical Electrodynamics*, United States of America. (1962).
- [13] MAIER, A. STEFAN. *Plasmonics, Fundamentals and Applications*, United Kingdom: University of bath, (2007).
- [14] ENOCH, STEFAN y BOND, NICOLAS *Plasmonics, From basis to Advanced Topics*, New York. (2012).

- [15] BOHREN, F. CRAIG. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, New York: John Wiley and Sons. (1940).
- [16] STRATTON, A. JULIUS. *Electromagnetic Theory*, New York: Mc. Graw Hill Book Company. (1941).
- [17] KREIBIG, UWE y VOLLMER MICHAEL *Optical Properties of Metal Crusters*, New York. (2012).
- [18] BERTOLOTTI, M., CONCITA S. *Evanescent Waves in Optics.*, Estados Unidos de América, Springer (2017).
- [19] SIMMONS, F. *Differential equations with applications and historical notes.*, Estados Unidos de América, Mc. Graw Hill (1972).
- [20] KITTEL, C. *Introduction to solid state physics*, 8th, New York. (2005).
- [21] JOHNSON, P. y CHRISTY, R. *Optical constants of the Noble Metals.*, Physical Review B. Darmouth college: Department of Physics and Astronomy, (1972).
- [22] CASTILLO, L. *Respuesta óptica de monómeros y dímeros de nanopartículas esféricas prolatas de plata*, CICESE. Programa de Posgrado en Ciencias en física de Materiales, (2016).
- [23] DERKACHOVA, A., KRZYSTYNA, K. y IRAIDA, D. *Dielectric Function for Gold in Plasmonics Applications.*, Springer. Institute of physics: Polish academy of sciences, (2015).
- [24] NOGUEZ, C. *Surface plasmons on metal nanoparticles: the influence of shape and physical environment.*, Instituto de física, UNAM, (2007).
- [25] CALANDER, N. y WILLANDER, M. *Theory of surface-plasmon resonance optical-field enhancement at prolate spheroids.*, Journal of applied Physics, (2002).
- [26] TOMIYA, S. y KAWAMURA, K. *Optical absorption of small metallic particles.*, Department of physics, Keio University, (1988).
- [27] EUGENE, HETCH. *óptica.*, Addison Wesley, Madrid. (2000).