

**Centro de Investigación Científica y de Educación
Superior de Ensenada, Baja California**



**Maestría en Ciencias
en Nanociencias**

**Estudio por simulación numérica de nanoestructuras
plasmónicas basadas en Origami de ADN**

Tesis
para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de
Maestro en Ciencias

Presenta:

Janz Felix Esquer

Ensenada, Baja California, México
2019

Tesis defendida por
Janz Felix Esquer

y aprobada por el siguiente Comité

Dr. Enrique Cuauhtémoc Samano Tirado
Director de tesis

Miembros del comité

Dra. Catalina López Bastidas

Dra. Karina Garay Palmett



Dr. Sergio Fuentes Moyado
Coordinador del Posgrado en Nanociencias

Dra. Rufina Hernández Martínez
Directora de Estudios de Posgrado

Janz Felix Esquer © 2019

Queda prohibida la reproducción parcial o total de esta obra sin el permiso formal y explícito del autor y director de la tesis.

Resumen de la tesis que presenta **Janz Felix Esquer** como requisito parcial para la obtención del grado de Maestro en Ciencias en Nanociencias.

Estudio por simulación numérica de nanoestructuras plasmónicas basadas en Origami de ADN

Resumen aprobado por:

Dr. Enrique Cuauhtémoc Samano Tirado
Director de tesis

En este trabajo se estudió la interacción de luz visible con un arreglo de tres nanopartículas metálicas colocados en los vértices de un triángulo equilátero de tamaño nanométrico por medio de cálculos teóricos y por simulación numérica. Para esto se analizaron varios casos para lograr el objetivo general. Primero se analizó el caso de una sola partícula esférica utilizando un modelo de COMSOL Multiphysics e implementando la teoría de Mie, que proporciona una solución exacta para el campo eléctrico de la onda dispersada, con el fin de comparar ambos resultados. Con esto es posible tener una idea de cómo se lleva a cabo la interacción con arreglos de varias nanopartículas. Para encontrar la solución en los distintos arreglos que se analizaron, se utilizó COMSOL Multiphysics y los resultados obtenidos se compararon con el método de la Matriz T. Este método consiste en que el campo dispersado del arreglo se escribe como la suma de los campos dispersados por cada una de las partículas que lo componen y, además, al analizar la dispersión de cada una de las partículas, se deben considerar los campos dispersados por cada una de las partículas restantes del arreglo (Daniel W. Mackowski, 1994). Finalmente, una vez comprobada la fiabilidad del modelo, se investigó la configuración óptima que maximiza la intensidad total del campo dispersado variando el tamaño, la separación y la composición de las nanopartículas.

Palabras clave: Plasmónica, Nanoestructuras, COMSOL, Matriz T, Teoría de Mie

Abstract of the thesis presented by **Janz Felix Esquer** as a partial requirement to obtain the Master of Science degree in Nanoscience.

Study by numerical simulation of plasmonic nanostructures based on DNA Origami

Abstract approved by:

Dr. Enrique Cuauhtémoc Samano Tirado
Thesis Director

In this work, the interaction of visible light with an array of three metal nanoparticles placed at the vertices of an equilateral triangle of nanometric size was studied by means of theoretical calculations and numerical simulation. For this, several cases were analyzed to achieve the general objective. First, the case of a single spherical particle was analyzed using a COMSOL Multiphysics model and implementing the Mie theory, which provides an exact solution for the electric field of the scattered wave, in order to compare both results. With this it is possible to have an idea of how the interaction with arrays of several nanoparticles is carried out. To find the solution in the different arrangements we analyzed, COMSOL Multiphysics was used and the results obtained were compared with the T-Matrix method. This method is that the scattered field of the array is written as the sum of the scattered fields of each of the particles that compose it and, in addition, when analyzing the scattering of each of the particles, the fields scattered by each of the remaining particles of the array must be considered (Daniel W. Mackowski, 1994). Finally, once the reliability of the model was checked, the optimal configuration was found which maximizes the total intensity of the dispersed field by varying the size, separation and composition of the nanoparticles.

Keywords: Plasmonic, Nanostructure, COMSOL, T-Matrix, Mie Theory

Dedicatoria

Agradecimientos

Se agradece el apoyo de las instituciones Centro de Investigación Científica e Investigación Superior de Ensenada (CICESE) y Centro de Nanociencias y Nanotecnología (CNyN), de PAPIIT-UNAM, proyecto IG100417, así como a CONACYT por la beca de posgrado número 488494.

Tabla de contenido

	Página
Resumen en español.....	ii
Resumen en inglés.....	iii
Dedicatorias.....	iv
Agradecimientos.....	v
Lista de figuras.....	viii
Lista de tablas.....	xii
Capítulo 1. Introducción.....	1
Capítulo 2. Antecedentes.....	6
2.1 Justificación.....	16
2.2 Objetivos.....	19
2.2.1 Objetivo general	19
2.2.2 Objetivos específicos.....	19
Capítulo 3. Metodología.....	21
Capítulo 4. Resultados.....	27
4.1 Caso 1: Trímero de partículas de oro con 28nm de radio y una separación entre partículas de 4nm en aire iluminado con una onda plana polarizada linealmente en X.....	28
4.1.1 Secciones transversales.....	28
4.1.2 Amplitud del campo eléctrico dispersado.....	29
4.2 Caso 2: Trímero de partículas de oro con 28nm de radio y una separación entre partículas de 4nm en aire iluminado con una onda plana polarizada linealmente en Z.....	30
4.2.1 Secciones transversales.....	30
4.2.2 Amplitud del campo eléctrico dispersado.....	31
4.3 Caso 3: Trímero de partículas de oro con 29nm de radio y una separación entre partículas de 2nm en aire iluminado con una onda plana polarizada linealmente en X.....	32
4.3.1 Secciones transversales.....	32
4.3.2 Amplitud del campo eléctrico dispersado.....	33

4.4	Caso 4: Trímero de partículas de oro con 29nm de radio y una separación entre partículas de 2nm en aire iluminado con una onda plana polarizada linealmente en Z.....	34
	4.4.1 Secciones transversales.....	34
	4.4.2 Amplitud del campo eléctrico dispersado.....	35
4.5	Caso 5: Trímero de partículas de plata con 28nm de radio y una separación entre partículas de 4nm en aire iluminado con una onda plana polarizada linealmente en X.....	36
	4.5.1 Secciones transversales.....	36
	4.5.2 Amplitud del campo eléctrico dispersado.....	38
4.6	Caso 6: Trímero de partículas de plata con 28nm de radio y una separación entre partículas de 4nm en aire iluminado con una onda plana polarizada linealmente en Z.....	39
	4.6.1 Secciones transversales.....	39
	4.6.2 Amplitud del campo eléctrico dispersado.....	41
4.7	Caso 7: Trímero de partículas de oro con 29nm de radio y una separación entre partículas de 2nm en aire iluminado con una onda plana polarizada linealmente en X.....	42
	4.7.1 Secciones transversales.....	42
	4.7.2 Amplitud del campo eléctrico dispersado.....	44
4.8	Caso 8: Trímero de partículas de oro con 29nm de radio y una separación entre partículas de 2nm en aire iluminado con una onda plana polarizada linealmente en Z.....	45
	4.8.1 Secciones transversales.....	45
	4.8.2 Amplitud del campo eléctrico dispersado.....	47
Capítulo 5. Discusión.....		48
Capítulo 6. Conclusiones.....		52
Literatura citada.....		54
Anexos.....		57
	Anexo A: Construcción de los armónicos esféricos vectoriales.....	57
	Anexo B: Expansión de E en armónicos esféricos vectoriales.....	67
	Anexo C: Eficiencias de extinción, absorción y dispersión de una partícula esférica	85

Lista de figuras

Figura	Página
Copa de Licurgo del siglo IV a.C.....	1
2 Detalle de la capilla de Sainte Chapelle.....	1
3 (a) Ilustración esquemática de una onda electromagnética y las cargas superficiales en la interfaz entre el metal y el material dieléctrico. (b) El componente del campo eléctrico local se intensifica cerca de la superficie y decae exponencialmente con la distancia en una dirección normal a la interfaz. Imagen modificada de Zhang et al. (Zhang et al., 2012).....	3
4 Esquema de la interacción de la luz con una NP metálico. El campo eléctrico de la luz induce el movimiento de electrones de conducción que se acumulan en la superficie NP creando un dipolo eléctrico. Esta acumulación de carga crea un campo eléctrico opuesto al de la luz incidente (Garcia, 2011).....	4
5 Dispersión por una partícula.....	6
6 El campo dispersado total en el punto P es la superposición de los campos individuales dispersados por las regiones en las que se divide la partícula.....	7
7 Imagen modificada de (Chuntonov y Haran, 2011). Espectro de dispersión de un trímico de nanopartículas de plata que muestra la separación de los modos resonantes debido al incremento gradual del ángulo del vértice. Las líneas negras delgadas son datos experimentales sin procesar; las líneas en color son el resultado después de filtrar la señal. Los grupos se excitan con luz no polarizada (verde) o luz linealmente polarizada a lo largo de las direcciones longitudinal (roja) y transversal (azul) (que se indican mediante flechas de colores coincidentes). Los espectros polarizados se normalizan a los picos correspondientes de los espectros no polarizados. Las imágenes TEM de los grupos se muestran en las inserciones (la barra de escala es de 50 nm). Las distribuciones calculadas de la carga superficial de los modos de enlace selectivamente excitados se muestran debajo de los espectros correspondientes.....	18
8 Mallado o discretización espacial realizada con COMSOL para una partícula esférica de 100nm con elementos de tamaño “normal” (izquierda) y “extremadamente fino” (derecha) de acuerdo a la nomenclatura usada por el programa.....	21
9 (a) Interpolación lineal de la parte real del índice de refracción de oro (izquierda) y plata (derecha). (b) Interpolación lineal de la parte imaginaria del índice de refracción de oro (izquierda) y plata (derecha). Datos obtenidos de (Johnson y Christy, 1972).....	22

10	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 10 nm de radio en aire.....	25
11	Intensidad del campo eléctrico dispersado por un par de partículas idénticas de oro con un radio de 29 nm en aire con una separación entre partículas de 2 nm iluminadas por una onda plana polarizada en x con una longitud de onda de 548 nm. Los datos fueron obtenidos con a) COMSOL y con b) el método de la matriz T...	26
12	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 548nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.....	28
13	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 547.5nm calculada con COMSOL.....	28
14	Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en x	29
15	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 548nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.....	30
16	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 547.5nm calculada con COMSOL.....	30
17	Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en z	31
18	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 548nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.....	32
19	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 567.5nm calculada con COMSOL.....	32
20	Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en x	33
21	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 548nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.....	34
22	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 567.5nm calculada con COMSOL.....	34
23	Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en z	35

24	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 430nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.....	36
25	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 420nm calculada con COMSOL.....	36
26	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 427.5nm calculada con COMSOL.....	37
27	Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en x.....	38
28	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 430nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.....	39
29	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 420nm calculada con COMSOL.....	39
30	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 427.5nm calculada con COMSOL.....	40
31	Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en z.....	41
32	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 451nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.....	42
33	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 445nm calculada con COMSOL.....	42
34	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 475nm calculada con COMSOL.....	43
35	Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en x.....	44
36	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 451nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.....	45
37	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 445nm calculada con COMSOL.....	45
38	Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 475nm calculada con COMSOL.....	46
39	Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en z.....	47

40	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 10 nm de radio en aire.....	86
41	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 25 nm de radio en aire.....	87
42	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 50 nm de radio en aire.....	88
43	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 100 nm de radio en aire.....	89
44	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 250 nm de radio en aire.....	90
45	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 10 nm de radio en aire.....	91
46	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 25 nm de radio en aire.....	92
47	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 50 nm de radio en aire.....	93
48	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 100 nm de radio en aire.....	94
49	Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 250 nm de radio en aire.....	95

Lista de tablas

Tabla		Página
1	Mediciones experimentales de los índices de refracción de oro y plata para las longitudes de onda dentro del espectro visible. (Johnson y Christy, 1972).....	27
2	Recopilación de los resultados obtenidos para las secciones transversales en todos los casos de estudio.....	48

Capítulo 1. Introducción

Tal vez de manera fortuita, sin saber por qué y cómo, el hombre ha utilizado las propiedades que presentan las pequeñas partículas metálicas cuando estas interactúan con luz desde los albores de la civilización. En la antigüedad, estas propiedades se empleaban de manera empírica para la coloración de vidrios con fines artísticos en utensilios y vitrales. Probablemente, el ejemplo más famoso de esto es la copa de Licurgo (Figura 1) del siglo IV que presenta un color rojizo si se ilumina desde el interior y un color verdoso si se hace desde el exterior. En la Edad Media, el desarrollo de procesos de elaboración de vidrio aumentó el uso de partículas metálicas para la coloración e indujo avances tecnológicos sobresalientes en la fabricación de vitrales que adornan cientos de capillas y catedrales (Sciau, 2012), como los que se aprecian en Sainte-Chapelle del siglo XIII en París (Figura 2), cuyos magníficos colores y efectos visuales se deben en gran parte a tales suspensiones coloidales (M. I. Stockman, 2011).



Figura 1. Copa de Licurgo del siglo IV a.C.



Figura 2. Detalle de la capilla de Sainte Chapelle.

Como ya se mencionó, todos estos desarrollos se lograron sin tener un conocimiento previo y razonado de como estos procesos producen efectos ópticos espectaculares ocasionados por introducir pequeñas partículas metálicas en el vidrio. Sin embargo, no fue sino hasta inicios del siglo XX que Gustav Mie publicó en su trabajo seminal sobre el estudio del origen de estos efectos al explicar las propiedades ópticas de sustancias coloidales conformadas por pequeñas partículas metálicas. La teoría de Mie no se pudo confirmar ni aprovechar en su momento debido a que estos efectos ópticos se presentan a escalas nanométricas. Esto se debió a que no era posible sintetizar y manipular las partículas a estas escalas de manera controlada dada la limitada capacidad tecnológica con la que se contaba en esa época. No fue sino hasta el desarrollo de la nanotecnología a finales del siglo XX que el estudio de estos efectos se extendió rápidamente en muchos campos debido a una diversidad de aplicaciones (García, 2011).

En primer lugar, es importante señalar que es posible estudiar las partículas metálicas desde un marco de referencia clásico sin importar que nos encontremos en escalas nanométricas, que son regidas principalmente por la mecánica cuántica. Esto se debe a que, a pesar de presentar niveles discretos de energía, las separaciones entre estos niveles son tan pequeñas dada la alta densidad de portadores de carga (electrones) que incluso una excitación térmica ($k_B T$) a temperatura ambiente es suficiente para que existan transiciones entre estos niveles (Stefan A. Maier, 2007). Esta cualidad permite considerar los niveles energéticos de un metal como continuos, lo que a su vez permite recurrir a modelos clásicos para su análisis. Por lo tanto, como primera aproximación podemos usar el modelo clásico de Drude para describir el comportamiento eléctrico de un metal. Este modelo nos dice que un metal se compone de un arreglo de iones positivos fijos y que los electrones se mueven libremente dentro del metal como si fuera un gas (Ashcroft y Mermin, 1976). El entendimiento de la interacción de los metales con luz está dado en gran medida por este gas de electrones libres, o gas de Fermi.

Según este modelo, los electrones libres oscilan alrededor de su posición de equilibrio al interactuar con una onda electromagnética debido al campo eléctrico que esta posee, esto se traduce en una fuerte dependencia de los metales con la frecuencia de la onda incidente. Lo que a su vez explica los distintos comportamientos que los metales poseen según la región del espectro electromagnético con el que se iluminen. Estas propiedades son descritas por una permitividad eléctrica compleja $\epsilon(\omega)$. A frecuencias ópticas, la mayoría de los metales poseen una permitividad negativa que causa, entre otras cosas, una alta reflectividad; es decir, no permite que las ondas electromagnéticas se propaguen a través de ellos y que sean opacos (Stefan A. Maier, 2007). Sin embargo, si nos trasladamos a escalas nanométricas, el gas de electrones libres del metal puede mantener oscilaciones debido a densidades de carga superficial y volumétrica llamadas plasmones de superficie (PS) (Novotny y Hecht, 2009). La existencia de los plasmones

de superficie es característica de la interacción de la luz con nanoestructuras metálicas y se dividen en dos categorías principales según el tipo de nanomaterial: los plasmones polaritones de superficie (PPS) y los plasmones localizados de superficie (PLS) (Murray y Barnes, 2007). Los PLS dispersan luz principalmente en el rango visible del espectro, por lo que es posible observar este fenómeno a simple vista cuando haya una alta concentración de partículas metálicas. La gran variedad de colores brillantes en los vitrales y utensilios ahora se puede explicar por la existencia de PLS.

Los PPS se asocian al acoplamiento de la luz con las oscilaciones de densidad de carga en la interfaz entre un metal y un dieléctrico que dan lugar a campos cercanos ópticos muy intensos que viajan y están confinados espacialmente en la interfaz, como se aprecia en la Figura 3. Estos pueden existir en cualquier interfaz y rango de frecuencias donde la parte real de la permitividad de los medios que la constituyen sean de signo contrario (Camacho B., 2012). De manera similar, si el gas de electrones está confinado en tres dimensiones, como es el caso de una nanopartícula, el desplazamiento de los electrones de su posición de equilibrio con respecto a los iones positivos fijos debido al campo eléctrico de la onda incidente genera una fuerza restauradora que da lugar a resonancias específicas o PLS. La intensidad de los PLS depende, entre otras cosas, de la geometría de la partícula y del medio dieléctrico que la rodea (Novotny y Hecht, 2009). Igual que en el caso anterior estas resonancias dan lugar a campos ópticos muy intensos con la diferencia de que estas ondas son excitaciones localizadas; es decir, están confinadas a la vecindad de la superficie de la partícula (Figura 4).

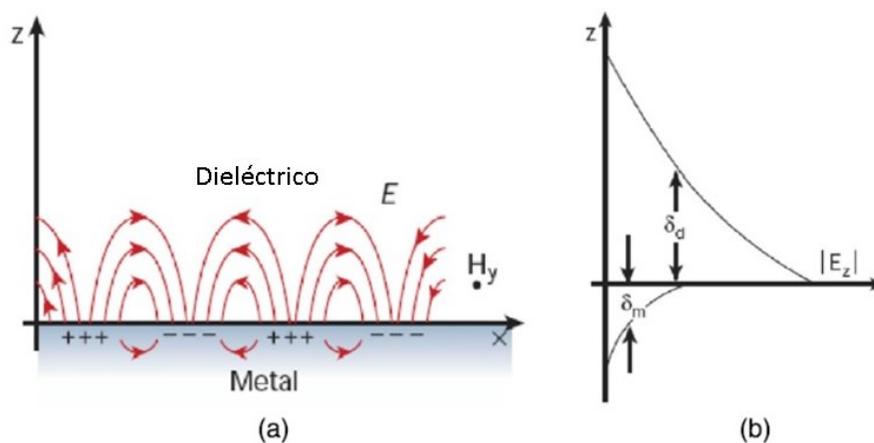


Figura 3. (a) Ilustración esquemática de una onda electromagnética y las cargas superficiales en la interfaz entre el metal y el material dieléctrico. (b) El componente del campo eléctrico local se intensifica cerca de la superficie y decae exponencialmente con la distancia en una dirección normal a la interfaz. Imagen modificada de Zhang et al. (Zhang et al., 2012).

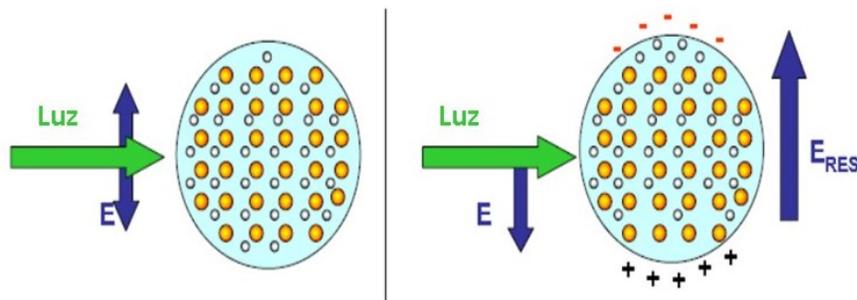


Figura 4. Esquema de la interacción de la luz con una NP metálica. El campo eléctrico de la luz induce el movimiento de electrones de conducción que se acumulan en la superficie NP creando un dipolo eléctrico. Esta acumulación de carga crea un campo eléctrico opuesto al de la luz incidente (García, 2011).

La resonancia del plasmón de superficie (PS) es la propiedad óptica más relevante de las nanoestructuras metálicas. El estudio de los fenómenos ópticos relacionados con la respuesta electromagnética de los metales en la nanoescala se denomina plasmónica o nanoplasmónica (M. I. Stockman, 2011). Este campo se encarga principalmente de aprovechar las propiedades resonantes de los plasmones con el fin de manipular la radiación a frecuencias ópticas, ya que permiten amplificarla y concentrarla en escalas por debajo del límite de difracción, dimensiones nanométricas, lo que no es posible con métodos convencionales (García, 2011). Además, un comportamiento similar no puede reproducirse simplemente en otros rangos espectrales ya que los parámetros característicos de los metales, como el índice de refracción, son función de la frecuencia. Esto significa que los resultados obtenidos con nanoestructuras metálicas a frecuencias ópticas no pueden obtenerse a distintas escalas, aun si la relación entre el tamaño de la estructura y la longitud de onda son las mismas, ya que un cambio en la longitud de onda involucra un cambio en la frecuencia y, como ya se mencionó, el comportamiento de los metales depende en gran parte de la misma (Novotny y Hecht, 2009).

Los efectos de confinamiento e incremento en la intensidad de la luz que presentan los PLS pueden ser utilizados en una amplia gama de aplicaciones tales como biomédicas, de energía, biosensores y de tecnología de la información (García, 2011). El desarrollo de nuevas capacidades tecnológicas en la fabricación y manipulación de nanomateriales han permitido predecir que los efectos de confinamiento y aumento en la intensidad de la luz se realzan considerablemente si se colocan dos o más partículas. Esto se debe a que ocurre un acoplamiento de los modos plasmónicos individuales semejante al enlace y

antienlace de átomos en la formación de una molécula (Camacho B., 2012). Por lo que se vislumbra la construcción de nano antenas (Biagioni et al., 2011) o guías de onda en el rango de luz visible (S. A. Maier et al., 2001) y nos abre las puertas al estudio de un sinfín de configuraciones posibles. Por esta razón, es de gran importancia el análisis numérico y por simulación de la interacción de ondas electromagnéticas con distintos arreglos de partículas metálicas. Esto con el fin de obtener algún modelo que nos permita predecir los distintos parámetros físicos (tamaño, separación entre partículas, medio, etc.) y visualizar los distintos comportamientos de una manera rápida y confiable antes de llevar a cabo algún experimento. Por lo tanto, el propósito de este trabajo es encontrar la respuesta plasmónica de un arreglo de tres partículas metálicas dispuestas en forma de triángulo equilátero colocadas en los vértices utilizando un modelo matemático y realizando una simulación por computadora. Esto con el fin de encontrar los parámetros óptimos que maximicen los efectos ópticos como la intensidad y el confinamiento para, de ese modo, obtener los mejores resultados en futuras aplicaciones.

Capítulo 2. Antecedentes

La comprensión de los fenómenos relacionados con plasmones de superficie localizados (LSP) y sus aplicaciones está directamente relacionado con la manera en la que se da la interacción de una onda electromagnética con una partícula o grupo de partículas. Se puede considerar como un obstáculo al papel que toman la partícula(s) durante esta acción. Esto conduce a que pueda ocurrir reflexión, fluorescencia, efecto Raman, absorción y dispersión (scattering) de la luz incidente dependiendo de la longitud de onda, polarización, medio dieléctrico y, en general, de las características físicas y geométricas de la(s) partícula(s). Como se mencionó en la introducción a esta tesis, si una partícula es iluminada por una onda electromagnética, los electrones de conducción en la partícula oscilan debido al campo eléctrico de la onda incidente. Este movimiento armónico de los electrones hace que se aceleren e irradien energía electromagnética en todas direcciones. A esta radiación secundaria se le llama radiación dispersada por el obstáculo. Además de irradiar energía electromagnética, las cargas excitadas pueden transformar parte de la energía electromagnética incidente en otras formas; por ejemplo, energía térmica en un proceso llamado absorción (Bohren, Craig F, Huffman, 1983) (Figura 5).

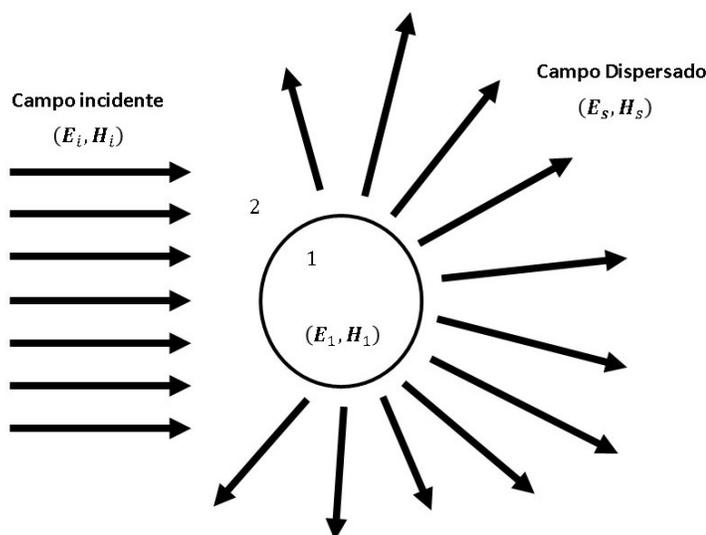


Figura 5. Dispersión por una partícula.

Una manera de entender el origen del campo electromagnético dispersado por una partícula es recordar que, a escalas atómicas, la materia se compone de cargas elementales discretas, electrones “libres” e iones positivos, pero neutra en general. El campo electromagnético de una onda incidente hace oscilar a los electrones a la misma frecuencia del haz, y, como ya se mencionó, estos irradian ondas electromagnéticas secundarias. La superposición de todas las ondas secundarias resulta en el campo total dispersado (Figura 6). Si las cargas no oscilan exactamente en fase con el campo incidente, entonces hay una disipación de energía electromagnética en el objeto. Esto significa que el objeto está absorbiendo energía (Mishchenko et al., 2006).

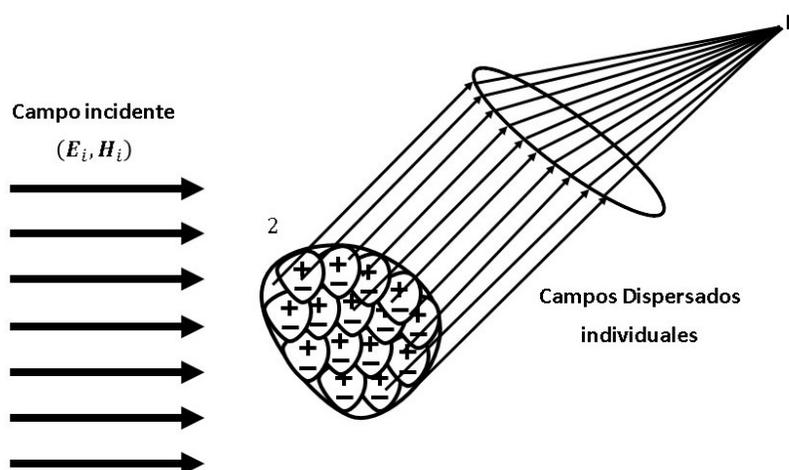


Figura 6. El campo dispersado total en el punto P es la superposición de los campos individuales dispersados por las regiones en las que se divide la partícula.

La dispersión electromagnética es un fenómeno extremadamente complejo porque una onda secundaria generada por una de estas cargas oscilantes también estimula a su vez las oscilaciones de todas las demás cargas que forman el objeto, lo que modifica sus respectivas ondas secundarias. Como resultado, todas las ondas secundarias se vuelven interdependientes. Además, el cálculo del campo total dispersado debido a la superposición de ondas secundarias debe tener en cuenta las diferencias de fase entre estos centros dispersores, que cambian cada vez que se modifica la incidencia y/o la dirección de dispersión. Por lo tanto, el campo total dispersado depende de la forma en que las cargas están dispuestas en el interior del objeto con respecto a la incidencia y direcciones de dispersión.

Dado que la cantidad de electrones que forman un objeto puede ser extremadamente grande, la solución directa del problema de dispersión mediante el cálculo y la superposición de todas las ondas secundarias es prácticamente imposible incluso con la ayuda de las computadoras modernas. Afortunadamente, el problema de la dispersión también se puede resolver utilizando los conceptos electromagnéticos a escala macroscópica, que tratan a la gran colección de cargas como uno o varios cuerpos macroscópicos con una distribución específica de una constante de permitividad. En consecuencia, el campo disperso se puede calcular resolviendo las ecuaciones de Maxwell para el campo electromagnético macroscópico sujeto a las condiciones de frontera apropiadas. Es este enfoque en el que se fundamenta la teoría moderna de la dispersión electromagnética de los objetos macroscópicos.

Las ecuaciones de Maxwell para el campo electromagnético macroscópico en el interior de materia homogénea e isotrópica en el sistema SI son las siguientes:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (2.4)$$

donde t es el tiempo, \mathbf{E} el campo eléctrico y \mathbf{H} el campo magnético, \mathbf{B} la inducción magnética, \mathbf{D} el desplazamiento eléctrico y ρ y \mathbf{J} las densidades de carga y corriente, respectivamente, asociadas a las llamadas cargas "libres". Todas las cantidades en las ecuaciones (2.1) - (2.4) son funciones de tiempo y coordenadas espaciales en general. Implícita en las ecuaciones de Maxwell se encuentra la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2.5)$$

que puede derivarse combinando la derivada temporal de la ec. (2.1) con la divergencia de la ec. (2.4). Existen relaciones constitutivas para \mathbf{D} y \mathbf{H} , dados en las ecuaciones (2.1) y (2.4), expresados por

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}, \quad (2.7)$$

donde \mathbf{P} es la polarización eléctrica (momento dipolar eléctrico promedio por unidad de volumen), \mathbf{M} es la magnetización (momento dipolar magnético promedio por unidad de volumen), ϵ_0 y μ_0 son la permitividad eléctrica y la permeabilidad magnética en el vacío. Las ecuaciones (2.1) - (2.7) son insuficientes para una determinación única de los campos eléctrico y magnético a partir de una distribución dada de cargas y corrientes, y deben complementarse con otras relaciones constitutivas:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{M} = \mu_0 \chi_m \mathbf{H}, \quad (2.9)$$

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E}, \quad (2.10)$$

donde σ es la conductividad eléctrica, χ_m y χ_e la susceptibilidad magnética y eléctrica del medio, respectivamente. Los *coeficientes fenomenológicos* σ , χ_m y χ_e dependen del medio considerado, pero se asumirá que son independientes de los campos (el medio es *lineal*), la posición (el medio es *homogéneo*) y la dirección (el medio es *isotrópico*). Sin embargo, no se asume que los coeficientes fenomenológicos son independientes de la *frecuencia* de la onda incidente. Además, los coeficientes fenomenológicos no están restringidos a ser reales, si la parte imaginaria de cualquiera de los coeficientes fenomenológicos de un medio es distinta de cero, entonces la amplitud de los campos disminuirá a medida que se propaga a través de dicho medio debido a la *absorción* de energía electromagnética. Por lo tanto, los coeficientes fenomenológicos complejos o, alternativamente, una diferencia de fase entre \mathbf{P} y \mathbf{E} (o \mathbf{B} y \mathbf{H}) se manifiestan físicamente por absorción (Bohren, Craig F, Huffman, 1983).

Utilizando la herramienta matemática de las transformadas de Fourier, podemos comprobar que cualquier función real arbitraria dependiente del tiempo, puede expresarse como la superposición de funciones armónicas en el tiempo con frecuencia positiva. Esto se aprecia en la expresión para la transformada de Fourier inversa

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{F}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (2.11)$$

En la naturaleza, no todos los campos electromagnéticos deben ser armónicos en el tiempo. Sin embargo, la expresión (2.11) nos indica que sólo es necesario considerar los campos armónicos ya que el campo dependiente del tiempo general puede construirse posteriormente. Por lo tanto, si se supone una dependencia temporal $e^{-i\omega t}$ para todos los campos, asumimos que no hay cargas libres ni corrientes y las relaciones constitutivas (2.8) - (2.10) se sustituyen en (2.1) – (2.4), obtenemos:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (2.12)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H}, \quad (2.13)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (2.14)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon\mathbf{E}, \quad (2.15)$$

donde la *permitividad* es compleja y dada por

$$\varepsilon = \varepsilon_0(1 + \chi) + i\frac{\sigma}{\omega}. \quad (2.16)$$

Las ecuaciones (2.12) - (2.16) generalmente son el punto de partida en los problemas de dispersión de ondas electromagnéticas.

En 1908, Gustav Mie desarrolló la teoría de la dispersión de la luz por una partícula con forma esférica, en un esfuerzo por comprender los variados colores en absorción y dispersión exhibidos por pequeñas partículas coloidales de oro suspendidas en agua (Bohren, Craig F, Huffman, 1983). Este desarrollo matemático se conoce como teoría de Mie y es de fundamental importancia en el tratamiento de problemas de absorción y dispersión debido a que brinda una solución exacta. A pesar de sus limitaciones para describir otras geometrías, esta teoría describe correctamente muchos efectos de partículas pequeñas que no son intuitivos y proporciona una descripción a primer orden de los efectos ópticos en partículas no esféricas. Por estas razones, la teoría de Mie puede tomarse como una base sólida para explicar los fenómenos relacionados con resonancias plasmónicas.

La Teoría de Mie es una solución de las ecuaciones de Maxwell aplicable a la dispersión de una onda plana incidente por una partícula esférica, isotrópica y no magnética en un medio isotrópico no absorbente. A

partir (2.12) – (2.15), se puede mostrar que un campo electromagnético variable en el tiempo (\mathbf{E}, \mathbf{H}) debe satisfacer las ecuaciones de onda de Helmholtz:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \quad (2.17)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0, \quad (2.18)$$

donde

$$k^2 = \omega^2 \mu \epsilon. \quad (2.19)$$

Aprovechando la simetría de la esfera, los campos \mathbf{E} y \mathbf{H} se expresan en términos de armónicos esféricos vectoriales \mathbf{M} y \mathbf{N} que están definidos de la siguiente manera (Anexo A):

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{emn} &= \nabla \times (\mathbf{r} \psi_{emn}), & \mathbf{M}_{omn} &= \nabla \times (\mathbf{r} \psi_{omn}), \\ \mathbf{N}_{emn} &= \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{emn}}{k}, & \mathbf{N}_{omn} &= \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{omn}}{k}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

donde

$$\begin{aligned} \psi_{emn} &= \cos m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(kr), \\ \psi_{omn} &= \sin m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(kr), \end{aligned} \quad (2.21)$$

$z_n(kr)$ es cualquiera de las funciones de Bessel esféricas $j_n, y_n, h_n^{(1)}, h_n^{(2)}$ y los subíndices e y o denotan la solución par e impar de la parte azimutal de la ecuación de Helmholtz (Anexo A), respectivamente. Debido a que las funciones $\cos m\phi, \sin m\phi, P_n^m(\cos \theta), z_n(kr)$ forman un conjunto completo ortonormal, cualquier solución a las ecuaciones de campo se puede expandir como una combinación lineal de las funciones \mathbf{M} y \mathbf{N} . A su vez, esto nos indica que los campos \mathbf{M} y \mathbf{N} son soluciones fundamentales; es decir, son los modos normales electromagnéticos de nuestra partícula esférica. Para cada par de subíndices m y n existen dos de estos modos: uno para el que no existe componente radial en el campo magnético llamado modo transversal magnético o TM y otro para el que no existe componente radial en el campo eléctrico llamado modo transversal eléctrico o TE. En general, un campo electromagnético es una superposición de estos modos normales. Siguiendo las consideraciones anteriores, Gustav Mie realizó una expansión para una onda plana polarizada linealmente en x (Anexo B), de la forma

$$\mathbf{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i \mathbf{N}_{e1n}^{(1)} \right) \quad (2.22)$$

donde el campo \mathbf{H}_i asociado se obtiene de la expresión (13) de modo que

$$\mathbf{H}_i = \frac{-k}{\omega\mu} E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\mathbf{M}_{e1n}^{(1)} + i \mathbf{N}_{o1n}^{(1)} \right). \quad (2.23)$$

En la expresión anterior, los superíndices (1) indican que se están utilizando las soluciones de Bessel del primer tipo J_n . Utilizando las condiciones de frontera

$$(\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_s - \mathbf{E}_1) \times \hat{\mathbf{e}}_r = (\mathbf{H}_i + \mathbf{H}_s - \mathbf{H}_1) \times \hat{\mathbf{e}}_r = 0, \quad (2.24)$$

donde los subíndices i, s y 1 corresponden a los campos incidente, dispersado e interno, respectivamente, como se aprecia en la Figura 6, la cual nos dice que las componentes tangenciales de los campos dentro y fuera de la partícula deben ser continuos, las expresiones para los campos interno ($\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1$) y dispersado ($\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$) son

$$\mathbf{E}_1 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(c_n \mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i d_n \mathbf{N}_{e1n}^{(1)} \right), \quad (2.25)$$

$$\mathbf{H}_1 = \frac{-k_1}{\omega\mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(d_n \mathbf{M}_{e1n}^{(1)} + i c_n \mathbf{N}_{o1n}^{(1)} \right), \quad (2.26)$$

$$\mathbf{E}_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i a_n \mathbf{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \mathbf{M}_{o1n}^{(3)} \right), \quad (2.27)$$

$$\mathbf{H}_s = \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i b_n \mathbf{N}_{o1n}^{(3)} + a_n \mathbf{M}_{e1n}^{(3)} \right), \quad (2.28)$$

donde $E_n = E_0 i^n (2n+1)/n(n+1)$, k_1 y μ_1 son el número de onda y la permeabilidad de la esfera, respectivamente. Además, los superíndices (3) indican que se están utilizando las soluciones de Bessel del tercer tipo, específicamente $h_n^{(1)}$ que describe ondas esféricas que emergen según la expansión asintótica

de las funciones de Hankel (Anexo A). Realizando un poco de Álgebra, Gustav Mie pudo encontrar expresiones para los coeficientes a_n , b_n , c_n , d_n . Estos tienen la forma siguiente

$$a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu_1 j_n(x) [m x j_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'}, \quad (2.29)$$

$$b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu j_n(x) [m x j_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'}, \quad (2.30)$$

$$c_n = \frac{\mu_1 j_n(x) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [x j_n(x)]'}{\mu_1 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'}, \quad (2.31)$$

$$d_n = \frac{\mu_1 m j_n(x) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 m h_n^{(1)}(x) [x j_n(x)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'}, \quad (2.32)$$

donde $x = ka = \frac{2\pi Na}{\lambda}$ es el factor de tamaño y $m = \frac{k_1}{k} = \frac{N_1}{N}$ es el índice de refracción relativo. Podemos apreciar que toda la información de nuestra partícula y medio circundante se encuentra en los coeficientes. Por lo tanto, cambios en el radio a de la partícula, su composición N_1 , o cambios en el medio ocasionan variaciones en la intensidad de los campos. Podemos apreciar que el denominador en a_n es idéntico al de d_n y lo mismo para b_n y c_n . Esto nos indica que sí, para una n determinada, la frecuencia es tal que el denominador de alguno de estos coeficientes es muy pequeño entonces el modo normal correspondiente será el dominante en el campo dispersado. Podemos apreciar de las expresiones (2.25) – (2.28) que el coeficiente a_n (y, por lo tanto, d_n) está asociado al modo TM, mientras que el coeficiente b_n (y, por lo tanto, c_n) está asociado al modo TE. Aunque, en general, como ya se mencionó, el campo dispersado es una superposición de estos modos normales.

Estos coeficientes, a veces llamados coeficientes Lorentz/Mie, son los que explican las propiedades de absorción o dispersión de la luz por partículas esféricas. Aunque se considera solo la dispersión de la luz polarizada en x , el campo dispersado para luz incidente con polarización lineal arbitraria, y por lo tanto cualquier estado de polarización, se deduce de la simetría de la partícula. Por lo tanto, una vez calculados los coeficientes, es posible determinar todas las cantidades medibles asociadas con la dispersión y la absorción, como las secciones transversales y los elementos de la matriz de dispersión o los parámetros

de Stokes, entre otros, que, a su vez, nos ayudan a definir usos o aplicaciones para estos fenómenos según los resultados obtenidos.

A pesar de que la teoría de Mie se conoce desde su desarrollo en 1908, no fue posible, en su momento, comprobarla debido al gran número de términos de las expansiones que se pueden requerir. En la actualidad, debido a las grandes capacidades computacionales ya no es difícil demostrarlo. Además, el rápido aumento de estas capacidades ha permitido formular métodos computacionales que permitan analizar no sólo una partícula sino arreglos de estas. Una de estas técnicas se conoce como método de la Matriz T. Esta fue desarrollada por Peter Waterman (Waterman, 1965) como una técnica para calcular la dispersión por una partícula con forma arbitraria basada en el principio de Huygens. Este método ha demostrado ser una herramienta muy poderosa y eficiente para calcular las propiedades de dispersión de arreglos conformados por hasta miles de partículas (D. W. Mackowski y Mishchenko, 2011), lo que ha ampliado sus usos y aplicaciones en muchas áreas (Mishchenko et al., 2004) y lo ha convertido en una de las más utilizadas en la actualidad.

La teoría detrás de este método ha sido descrita en detalle por D. Mackowski (Daniel W. Mackowski, 1994) pero, en general, la construcción de la matriz T sigue un procedimiento similar al de la teoría de Mie apoyado en el principio de superposición. Siguiendo este principio, se tiene que el campo total dispersado es la suma de los campos dispersados por toda las partículas que conforman el arreglo, de modo que

$$\mathbf{E}_S = \sum_i^{N_s} \mathbf{E}_S^i, \quad (2.33)$$

donde el superíndice i indica el campo dispersado por la esfera i , N_s el número de esferas en el arreglo y la expresión correspondiente para los campos \mathbf{E}_S^i de las esferas individuales están dados en la expresión (2.27). Aplicando las condiciones de frontera (2.24) a cada esfera, se puede obtener un sistema de ecuaciones que en forma matricial se escribe

$$\mathbf{a}_{mnp}^i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_s} \sum_{l=1}^{N_t^j} \sum_{k=-l}^l \sum_{q=1}^2 T_{mnpklq}^{ij} \mathbf{p}_{klq}^j, \quad (2.34)$$

donde N_s corresponde al número de partículas, los subíndices m y n son los correspondientes a los campos \mathbf{M} y \mathbf{N} de la expansión en armónicos esféricos, el subíndice p en \mathbf{a}_{mnp}^i indica el coeficiente de expansión a_{mn}^i o b_{mn}^i del campo dispersado por la esfera i , de acuerdo con (2.27) y en \mathbf{p}_{klq}^j los coeficientes de expansión del campo incidente (p_{mn}^i, q_{mn}^i) , los cuales se definen inicialmente de acuerdo a su dirección de propagación y estado de polarización. La expresión (2.34) nos indica que existe una relación lineal entre los coeficientes de expansión del campo incidente \mathbf{p}_{klq}^j y los coeficientes del campo dispersado \mathbf{a}_{mnp}^i que está definida por la matriz de transición (o matriz T) T_{mnpklq}^{ij} .

La matriz T tiene toda la información de los campos dispersados por las partículas individuales y la relación (2.34) nos permite determinar los coeficientes del campo dispersado por la esfera i tomando en cuenta la contribución de los campos dispersados por las otras esferas j en la vecindad de i . Una vez obtenida la forma de los coeficientes de cada una de las esferas del ensamble, es posible obtener toda la información que necesitemos del campo dispersado.

La ventaja clave de la técnica de la Matrix T es que los elementos de la matriz T dependen sólo del índice de refracción relativo de la partícula $m = \frac{N_1}{N}$ (N_1 es el índice de refracción complejo de la partícula, N es el índice de refracción del medio circundante), el factor de tamaño $x = \frac{2\pi Na}{\lambda}$ (a es el radio de la esfera y λ es la longitud de onda en el vacío), y la orientación de las partículas con respecto al sistema de coordenadas, por lo que una vez que se ha determinado, los campos dispersados se pueden calcular para cualquier orientación de partículas sin tener que resolver el problema desde cero.

Toda la teoría mostrada anteriormente contiene la información necesaria para el estudio de arreglos arbitrarios de partículas metálicas y nos proporciona la manera de determinar la distribución del campo dispersado total. Esto con el fin de encontrar las regiones de máxima intensidad; que son zonas donde los campos dispersados por las partículas individuales interfieren constructivamente. Además, nos permitirá manipular todos los parámetros posibles, con el fin de obtener las condiciones que maximicen el confinamiento y resulte la mayor intensidad posible.

2.1 Justificación

Es indudable que una de las preocupaciones en la actualidad del ser humano es el aprovechamiento de distintas fuentes de energía limpia o renovable como alternativa a los combustibles fósiles. Esta inquietud se ha acentuado debido a las aterradoras consecuencias del calentamiento global en nuestro planeta con el incremento de CO₂ en la atmósfera, siendo el consumo de energéticos convencionales uno de los responsables. Entre estas se destaca el uso del Sol debido a la gran cantidad de energía que libera cada día, aproximadamente 4000 veces el consumo de energía eléctrica en todo el mundo. Así mismo, por la facilidad con la que se puede cosechar su energía a través de una gran variedad de técnicas como la fotovoltaica, fotoquímica o fototérmica. Actualmente, los dispositivos fotovoltaicos representan la forma que más se explota en la cosecha solar. Sin embargo, aún los dispositivos más modernos alcanzan una eficiencia de aproximadamente el 25%. Esto debido a las grandes pérdidas en los procesos de absorción y conversión de la luz. Además, para incrementar la eficiencia se requieren grandes grosores en las celdas que permitan absorber más luz lo que ocasiona mayores costos de producción. Por lo tanto, aún las celdas solares de última generación no son económicamente viables y la búsqueda de nuevos métodos que mejoren la eficiencia de estos dispositivos sigue siendo un problema abierto en la actualidad.

Las capacidades de concentración y amplificación de la luz debido a plasmones localizados de superficie (LSP) podrían ser una solución para mejorar la eficacia de los dispositivos fotovoltaicos. Estos dispositivos están basados en el efecto fotoeléctrico que indica que un electrón puede ser liberado de un material si absorbe la energía de un fotón con determinada longitud de onda. Mientras mayor sea la intensidad de la luz, mayor será el número de fotones por lo que la cantidad de electrones libres aumenta. Por lo tanto, si, por ejemplo, se coloca un arreglo de nanopartículas metálicas que maximice la resonancia plasmónica en la cercanía de una celda solar y que, además, la luz dispersada se encuentre en dirección normal a la superficie de la celda, provocaría un incremento significativo en la eficiencia del dispositivo. Sin embargo, el problema que surge es el de encontrar un arreglo de nanopartículas *ad-hoc* que cumpla con estas condiciones y, de encontrarlo, cómo podría fabricarse.

Una forma de enfrentar esta dificultad es recordar que el arreglo de un par de nanopartículas metálicas colocadas muy cerca una de la otra es uno de los arreglos más estudiado en la actualidad en el campo de plasmónica. Estos arreglos se conocen como nanoantenas, o antenas ópticas (Bharadwaj et al., 2009). La fuerte interacción entre las cargas superficiales inducidas en cada una de las partículas da como resultado modos plasmónicos acoplados que permiten capturar y enfocar la luz en regiones localizadas entre la separación de las nanopartículas. A estas regiones se les llama "hot spots" (M. Stockman et al., 1996) y

pueden llegar a ser de apenas un par de nanómetros, por lo que existe la posibilidad de que los efectos plasmónicos de arreglos de nanopartículas sean mayores que los de las partículas individuales (Biagioni et al., 2011). Debido a que estas regiones en las que se confina la luz son del orden nanométrico, las nanoantenas pueden ser utilizadas para detectar la presencia de gases o partículas (Li et al., 2015). El problema que presenta este tipo de arreglos es que se requiere hacer incidir luz linealmente polarizada a lo largo de la dirección colineal del arreglo. Este es un inconveniente significativo cuando se tiene una colección muy grande de nanoantenas, ya que se requeriría que todas estuvieran alineadas en la misma dirección, como se tendrían en una celda solar. Por lo tanto, para poder aprovechar al máximo las propiedades de los plasmones de superficie localizados en cosecha solar, se requiere encontrar un arreglo de nanopartículas metálicas cuya respuesta de la luz dispersada sea invariante al estado de polarización de la luz. Dada la naturaleza misma de los plasmones localizados, podemos deducir que cualquier arreglo conformado por lo menos de dos nanopartículas requerirá de un estado de polarización específico. Por lo tanto, el punto inicial para este trabajo sería considerar arreglos más complejos conformados por más de dos nanopartículas.

Los modos plasmónicos de una nanopartícula individual, que corresponden a varios órdenes multipolares de la solución de Mie para la interacción con un campo electromagnético, son análogos a los estados electrónicos de un átomo. Cuando las partículas se disponen en un arreglo, estos modos interactúan fuertemente para formar nuevos modos acoplados o hibridizados correspondientes, en analogía con los orbitales moleculares formados por una combinación lineal de orbitales atómicos. Al igual que los orbitales moleculares, los modos plasmónicos pueden designarse como de enlace o antienlace, dependiendo de si la carga inducida se distribuye en la configuración de baja o alta energía. Por lo tanto, la disposición exacta de las nanopartículas dentro de un arreglo tiene un impacto esencial en la simetría de los estados plasmónicos resultantes.

En un trabajo realizado por L. Chuntonov *et al.* (Chuntonov y Haran, 2011) se presenta un estudio teórico y experimental, usando espectroscopia de plasma e imágenes TEM, de arreglos conformados por nanopartículas de plata con un diámetro aproximado de 60 nm cada una. L. Chuntonov *et al.* lograron visualizar por TEM ensambles formados por tres nanopartículas con una separación entre estas de aproximadamente un nanómetro, como se muestran en la figura 7. El arreglo bidimensional de tres nanopartículas metálicas con mayor simetría resultó ser el de un triángulo equilátero donde las nanopartículas se encontrarían en los vértices de este. De los resultados obtenidos los autores encontraron que, para un arreglo con forma de triángulo equilátero, la respuesta plasmónica es prácticamente invariante al estado de polarización. Sin embargo, al variar el ángulo en los vértices de las

nanopartículas a un valor distinto a 60° , se rompe esta simetría y ocurre que el estado de polarización depende de cómo se encuentren dispuestas geoméricamente las nanopartículas (Figura 7).

El alto grado de simetría de un arreglo de nanopartículas con forma de triángulo equilátero podría dar solución a los problemas de eficiencia en celdas solares. Esto debido a que solo se requiere que el campo eléctrico se encuentre en el mismo plano en el que se encuentra el arreglo, sin importar el estado de polarización de la luz incidente. Por lo tanto, solo haría falta encontrar un método que permita construir estos arreglos de manera controlada y con precisión.

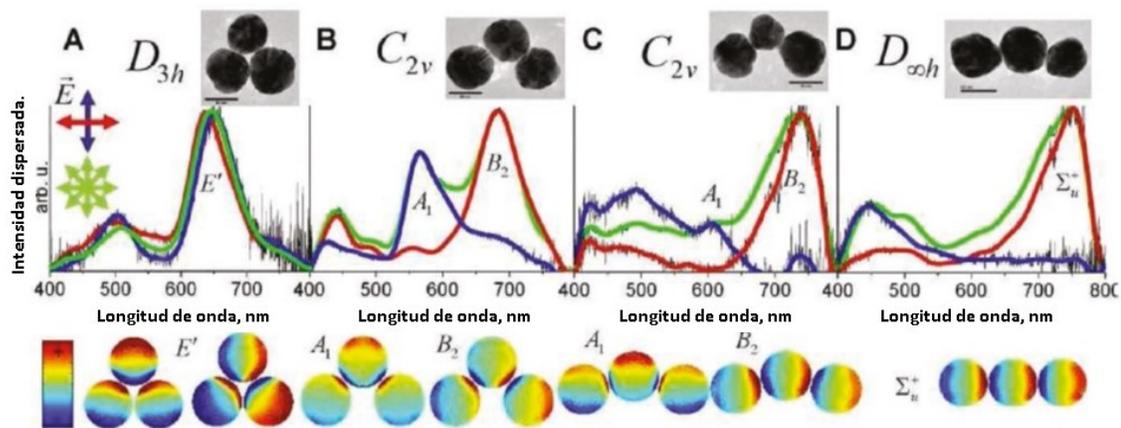


Figura 7. Imagen modificada de (Chuntonov y Haran, 2011). Espectro de dispersión de un trímero de nanopartículas de plata que muestra la separación de los modos resonantes debido al incremento gradual del ángulo del vértice. Las líneas negras delgadas son datos experimentales sin procesar; las líneas en color son el resultado después de filtrar la señal. Los grupos se excitan con luz no polarizada (verde) o luz linealmente polarizada a lo largo de las direcciones longitudinal (roja) y transversal (azul) (que se indican mediante flechas de colores coincidentes). Los espectros polarizados se normalizan a los picos correspondientes de los espectros no polarizados. Las imágenes TEM de los grupos se muestran en las inserciones (la barra de escala es de 50 nm). Las distribuciones calculadas de la carga superficial de los modos de enlace selectivamente excitados se muestran debajo de los espectros correspondientes.

Un esquema práctico alternativo al descrito por L. Chuntonov *et al.* para construir nanoestructuras plasmónicas con características “hechas a la medida” es Nanotecnología basada en ADN (Xavier y Chandrasekaran, 2018). La tecnología moderna ha impulsado a lo largo de los años la tendencia de realizar dispositivos cada vez más pequeños y poderosos. En el año 1982, Nadrian Seeman creó una técnica de autoensamblado llamada Nanotecnología basada en ADN (Seeman, 1982, 2004) para construir nanoestructuras. Esta técnica, como su nombre lo indica, utiliza el ADN como material de construcción para formar diferentes estructuras a escala nanométrica gracias a las dimensiones mismas del ADN.

Posteriormente, Paul Rothemund conceptualizó, desarrolló y probó una novedosa y sencilla técnica para fabricar nanoestructuras usando ácidos nucleicos denominada Origami de ADN (Rothemund, 2006). A su vez, estas estructuras pueden servir como andamios o soportes para unir u organizar todo tipo de componentes inorgánicas de manera muy precisa en sitios programados y localizados en la estructura misma. De esta manera, se pueden crear conjugados ADN: nanopartículas metálicas, nanoestructuras con arreglos prediseñados de nanopartículas metálicas, muy específicos con separaciones de unos pocos nanómetros (Samano, 2012).

Dicho lo anterior, es posible y deseable realizar un análisis numérico y por simulación del arreglo antes mencionado que sirva como una herramienta para estimar los parámetros físicos que optimizan la respuesta plasmónica que maximice la intensidad de la luz dispersada. Esto brindaría una idea más clara sobre los materiales y dimensiones requeridas en la nanoestructura plasmónica, lo que ayudaría a predecir el diseño y fabricación de los arreglos que garanticen la mejora en eficiencia de dispositivos fotovoltaicos.

2.2 Objetivos

2.2.1 Objetivo General:

Determinar la distribución e intensidad del campo de la luz dispersada por un trímero de nanopartículas metálicas colocadas cada una en los vértices de un triángulo equilátero bajo diferentes condiciones.

2.2.2 Objetivos específicos:

Calcular la distribución e intensidad del campo eléctrico de una onda electromagnética debido a absorción y dispersión para los siguientes casos:

- Caso 1: Una sola partícula con forma esférica.
- Caso 2: Dímero de nanopartículas esféricas.

- Caso 3: Trímero de nanopartículas esféricas colocadas en los vértices de un triángulo equilátero.

En los casos anteriores, se variará la composición, diámetro de las nanopartículas, así como la longitud y polarización de la onda incidente.

Capítulo 3. Metodología

El primer paso para lograr los objetivos propuestos es crear un modelo que permita el análisis del arreglo propuesto. Para esto utilicé el programa COMSOL Multiphysics; una herramienta computacional que permite analizar un sinfín de fenómenos físicos utilizando el método numérico de elementos finitos (FEM, por sus siglas en inglés). El método de elementos finitos se basa en resolver el problema de dispersión de una onda electromagnética por una partícula en el dominio de la frecuencia discretizando la ecuación de onda (ecuaciones 2.17 y 2.18 del capítulo de antecedentes) en el espacio. Posteriormente, el problema en cuestión se resuelve numéricamente para encontrar los campos que satisfagan las condiciones de frontera (ecuación 2.24 en antecedentes). Los parámetros del material se introducen a través del vector de onda, cuya magnitud se muestra en la ecuación (2.19) de los antecedentes. La región del espacio del problema general a solucionar se divide en muchas regiones pequeñas (mallado), que a menudo son de forma tetraédrica. Los campos eléctrico y magnético dentro de cada región se describen mediante una función local. Dado que los tetraedros tienen caras planas, no pueden representar exactamente la superficie de un objeto curvo, como una esfera, pero al reducir su tamaño (mallado más fino) y usando un número grande de estos es posible obtener una aproximación bastante razonable de su geometría, como se aprecia en la Figura 8. Sin embargo, esto implica principalmente un aumento considerable en los tiempos de cómputo. Un punto clave en el enfoque FEM es que debe evitarse que los campos dispersados se reflejen en el límite del dominio computacional y se conviertan en dispersiones secundarias ficticias. En COMSOL, esta reflexión interna no deseada se evita utilizando un método llamado PML (Perfect Match Layer, por sus siglas en inglés). Este consiste en una capa externa que cubra el dominio computacional y hecha de un medio hipotético que sea 100% absorbente.

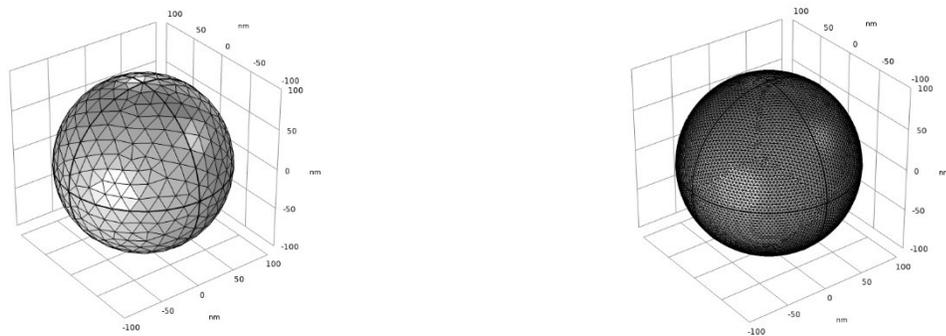


Figura 8. Mallado o discretización espacial realizada con COMSOL para una partícula esférica de 100nm con elementos de tamaño “normal” (izquierda) y “extremadamente fino” (derecha) de acuerdo a la nomenclatura usada por el programa.

Las respuestas plasmónicas en nanopartículas ocurren principalmente en el rango visible; sin embargo, es parte de la solución del problema determinar la frecuencia (o longitud de onda) exacta a la que esto ocurre. De aquí que es necesario realizar los cálculos para un cierto rango de frecuencias para determinar la que maximice la respuesta plasmónica. COMSOL cuenta con la información de un amplio repertorio de materiales, que además permite crear interpolaciones con datos experimentales, por lo que es posible construir una función que cubra el rango de frecuencias necesario si tenemos un número grande de mediciones. Para este trabajo utilizamos los datos del índice de refracción obtenidos por P.B. Johnson *et al.* (Johnson y Christy, 1972) para oro y plata. En la Figura 9 se aprecia la interpolación hecha en COMSOL para la parte real e imaginaria del índice de refracción para oro y plata.

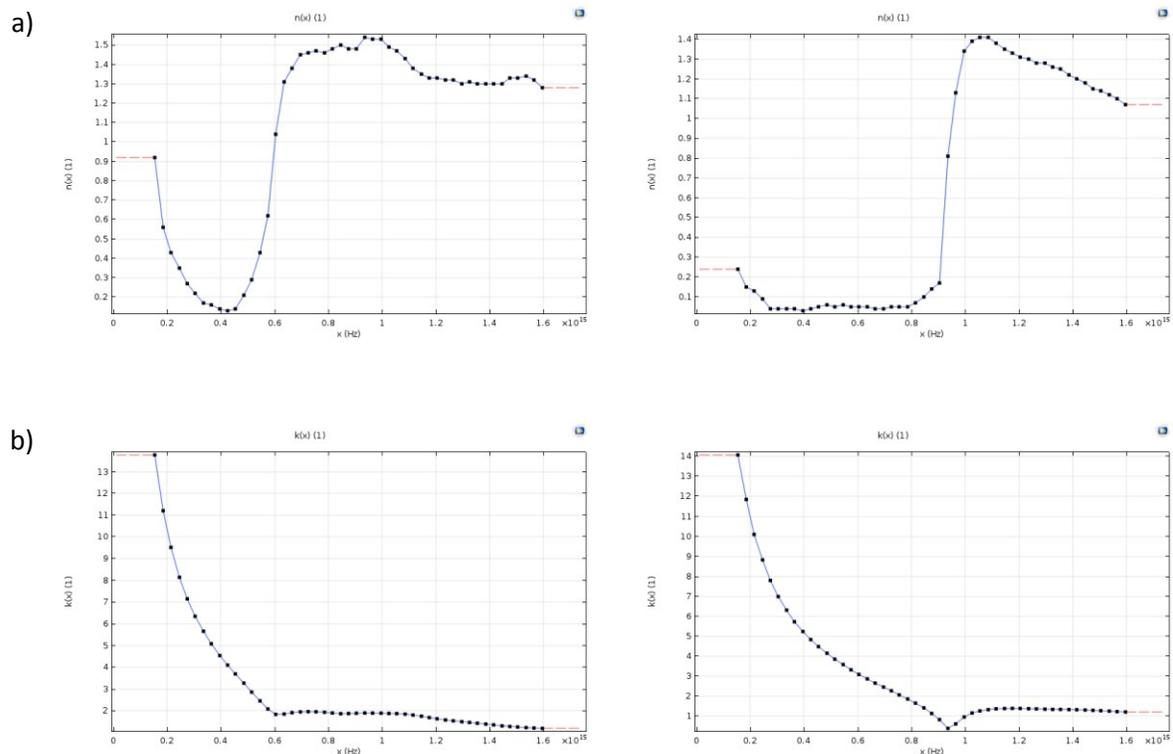


Figura 9. (a) Interpolación lineal de la parte real del índice de refracción de oro (izquierda) y plata (derecha). (b) Interpolación lineal de la parte imaginaria del índice de refracción de oro (izquierda) y plata (derecha). Datos obtenidos de (Johnson y Christy, 1972).

El interés en este caso es la dispersión por una partícula esférica, isotrópica y no magnética en un medio isotrópico no absorbente cuando incide una onda plana, por lo que solo los datos anteriores para el índice de refracción son suficientes para lograr el objetivo. En este tipo de estudios, los resultados se expresan normalmente en términos de las llamadas secciones transversales de dispersión y absorción y la suma de

ambas que llamaremos de extinción, por su traducción literal del inglés *extinction*, que representa la cantidad total de energía absorbida y dispersada por la partícula. Si se ilumina una o más partículas con una onda electromagnética, la energía electromagnética recibida por un detector colocado detrás de estas sería U . Ahora bien, si la o las partículas son removidas, la energía recibida por el detector es U_0 (la energía del campo incidente), tal que $U_0 > U$. Por lo tanto, si el medio en el que están las partículas no es absorbente, la diferencia $U_0 - U$ indica que la presencia de una o más partículas provoca absorción y dispersión por las partículas cuando incide un haz. La disminución de la energía incidente (extinción) depende, en general, de la composición química de las partículas, tamaño, geometría, orientación, el medio envolvente, el número de partículas, distancia entre ellas, el estado de polarización y la frecuencia del haz incidente, entre otros parámetros.

Es posible obtener expresiones exactas para las secciones transversales de una esfera calculando la potencia neta W_a a la que la energía electromagnética incidente cruza la superficie A de una esfera imaginaria centrada en la partícula dispersora (Bohren, Craig F, Huffman, 1983). Si el medio circundante no absorbe, W_a es independiente del radio de la esfera imaginaria por lo que por conveniencia podemos elegir que sea lo suficientemente grande como para poder utilizar la aproximación de campo lejano. Siguiendo esto, W_a puede escribirse como la suma de 3 términos: $W_a = W_i - W_s + W_{ext}$, donde

$$W_i = - \oint_A \mathbf{S}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_r dA, \quad W_s = \oint_A \mathbf{S}_s \cdot \hat{\mathbf{e}}_r dA, \quad W_{ext} = - \oint_A \mathbf{S}_{ext} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r dA.$$

tal que \mathbf{S}_i es el vector de Poynting asociado a la onda incidente e independiente de la posición debido a que el medio no absorbe; \mathbf{S}_s es el vector de Poynting del campo dispersado; y podemos interpretar a \mathbf{S}_{ext} como el término que surge debido a la interacción entre las ondas incidente y dispersada. La contribución de W_i es nula en una superficie cerrada si el medio no absorbe, por lo que podemos determinar que W_{ext} es la suma de la tasa de energía absorbida y la tasa de energía dispersada:

$$W_{ext} = W_a + W_s$$

Dividiendo todo entre la irradiancia incidente I_i , que es la magnitud de \mathbf{S}_i , obtenemos:

$$C_{ext} = C_a + C_s, \tag{3.1}$$

donde C_{ext} es la sección transversal de extinción y, para una esfera, está dada por

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}\{a_n + b_n\}, \quad (3.2)$$

C_s es la sección transversal de dispersión, cuya expresión es

$$C_{sca} = \frac{W_s}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2), \quad (3.3)$$

C_a , la sección transversal de absorción, se determina mediante (3.1) y los coeficientes a_n y b_n corresponden a los coeficientes de Lorentz/Mie mencionados en el capítulo de antecedentes.

Para este trabajo decidimos utilizar COMSOL como la herramienta principal, sin embargo, era necesario asegurar primeramente que el modelo fuera verosímil. Con el fin de comprobar que el modelo de COMSOL arrojaba resultados confiables se analizó el caso de una sola partícula esférica. Con la información anterior fue posible calcular las secciones transversales de una partícula esférica sustituyendo las expresiones para los coeficientes a_n y b_n en (3.2) y (3.3) por los de la teoría de Mie, ecuaciones 2.29 y 2.30, desarrolladas en el capítulo de Antecedentes. Posteriormente se prosiguió a realizar el modelo en COMSOL para una partícula esférica y se compararon los resultados obtenidos con ambos métodos. Para ir acorde a la literatura, los resultados se expresaron en términos de las eficiencias Q , que corresponden a las secciones transversales de extinción, dispersión o absorción divididas entre la sección transversal geométrica de la partícula (πr^2 para una esfera). En la Figura 10 se muestra la comparación entre los resultados obtenidos para las eficiencias de extinción, dispersión y absorción de una partícula esférica de oro con un radio de 10 nm en aire iluminadas por una onda plana polarizada en x , donde se aprecia la similitud de las curvas en estas gráficas. Otros resultados donde se aprecia la misma semejanza para distintos radios y para plata se presentan en el Anexo C.

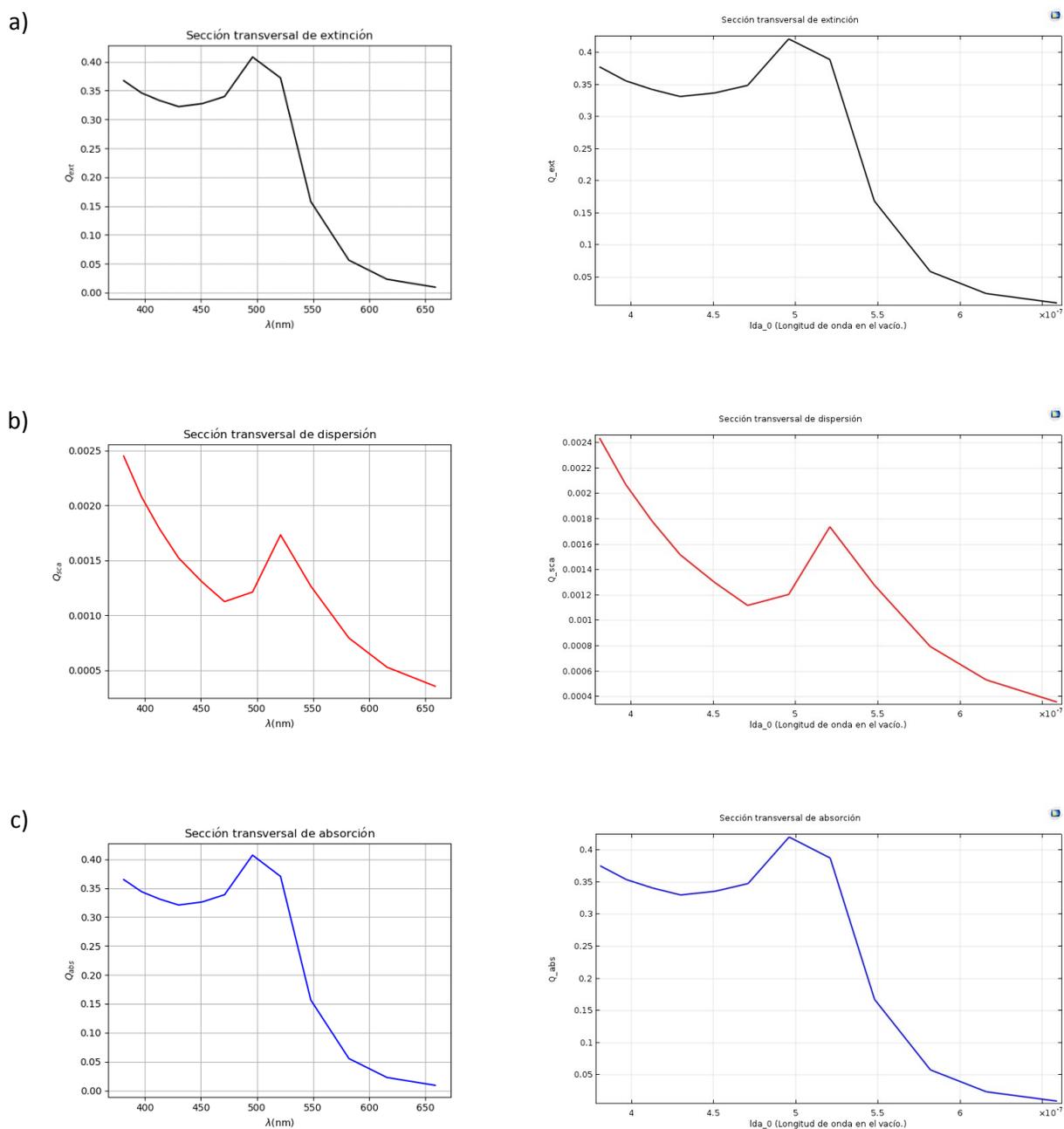


Figura 10. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 10 nm de radio en aire.

Los resultados mostrados anteriormente, permitieron considerar como cualitativamente adecuados a los resultados obtenidos por el modelo realizado en COMSOL. Esto da certidumbre y confianza a los casos que involucran a más de una partícula. Para esto se agregó una segunda partícula al modelo en COMSOL, lo cual no presenta ninguna dificultad y solo fue necesario modificar algunas secciones que no afectan la

física del problema. A partir de este momento, el análisis mediante la teoría de Mie no fue posible debido a la complejidad presentada en casos con más de una partícula. Por esta razón, fue necesario el método de la Matriz T, introducido en el capítulo de Antecedentes, para los análisis posteriores. Para lograr esto, se usó el código de un programa realizado por Mackowski *et al.* (D. W. Mackowski y Mishchenko, 2011) que permite calcular la magnitud del campo eléctrico dispersado y las secciones transversales, entre otras cantidades de interés. En la Figura 11 se muestra la comparación de la magnitud del campo eléctrico dispersado obtenido usando COMSOL y el calculado con el método de la matriz T, donde el cociente $\frac{|E_s|^2}{|E_i|^2}$ indica que la magnitud del campo dispersado se normaliza con respecto al incidente. La amplitud mostrada se obtuvo usando una amplitud incidente de 1 V/m para un par de partículas esféricas idénticas compuestas de oro con un radio de 29nm y una separación de 2nm entre sus superficies. Las partículas en la Figura 11 se colocaron de manera tal que sus centros son colineales a lo largo de la dirección x e iluminadas por una onda plana polarizada en la misma dirección con una longitud de onda de 548 nm en aire.

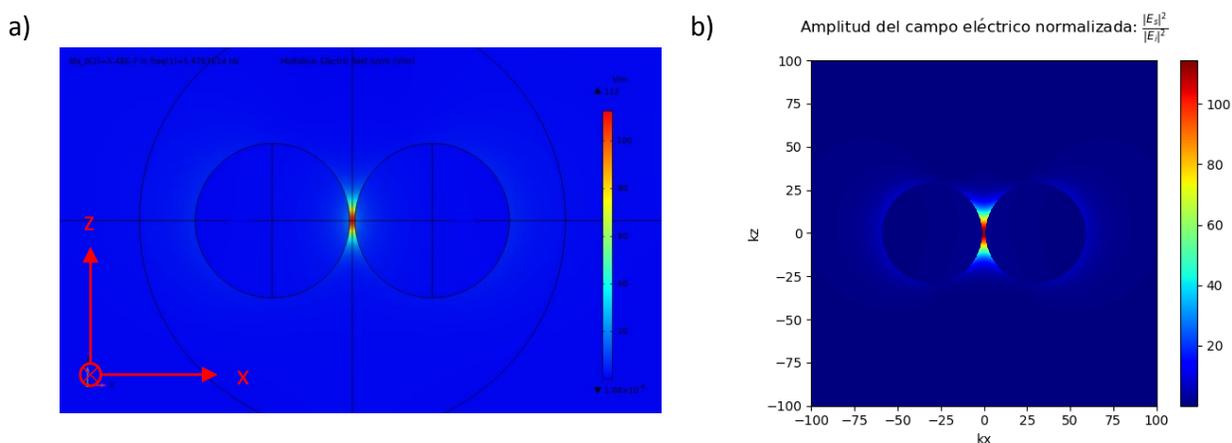


Figura 11. Intensidad del campo eléctrico dispersado por un par de partículas idénticas de oro con un radio de 29 nm en aire con una separación entre partículas de 2 nm iluminadas por una onda plana polarizada en x con una longitud de onda de 548 nm. Los datos fueron obtenidos con a) COMSOL y con b) el método de la matriz T.

Una vez logrado lo anterior, fue posible proceder a realizar los modelos para analizar y simular un arreglo de tres nanopartículas colocadas en los vértices de un triángulo equilátero, siendo éste el objetivo principal de este trabajo. Los resultados obtenidos se muestran en el siguiente capítulo.

Capítulo 4. Resultados

A continuación, se presentan los resultados obtenidos del análisis de resonancia plasmónica de un arreglo de tres nanopartículas dispuestas en forma de triángulo equilátero colocadas en los vértices para partículas compuestas de oro y plata, dos distintos radios, 28 y 29 nm, en un rango de longitudes de onda de aproximadamente 380 a 700 nm y dos estados de polarización distintos siendo aire, no absorbente, el medio en que se propagan las ondas electromagnéticas. Para los resultados obtenidos por el método de la matriz T se escogieron longitudes de onda correspondientes al espectro visible según los datos experimentales de Johnson *et al.* (Johnson y Christy, 1972). En la tabla siguiente se muestran estos datos junto con la parte real e imaginaria de los índices de refracción, n y k respectivamente, correspondientes para oro y plata:

Tabla 1. Mediciones experimentales de los índices de refracción de oro y plata para las longitudes de onda dentro del espectro visible. (Johnson y Christy, 1972)

eV	Ω	λ	Plata		Oro	
			n	k	N	k
1.88	2.85622262E+15	6.59012073E-07	0.05	4.483	0.14	3.697
2.01	3.05372737E+15	6.16389402E-07	0.06	4.152	0.21	3.272
2.13	3.23603945E+15	5.81663238E-07	0.05	3.858	0.29	2.863
2.26	3.43354421E+15	5.48204734E-07	0.06	3.586	0.43	2.455
2.38	3.61585629E+15	5.20564159E-07	0.05	3.324	0.62	2.081
2.5	3.79816837E+15	4.95577079E-07	0.05	3.093	1.04	1.833
2.63	3.99567313E+15	4.71080874E-07	0.05	2.869	1.31	1.849
2.75	4.17798521E+15	4.50524617E-07	0.04	2.657	1.38	1.914
2.88	4.37548996E+15	4.30188437E-07	0.04	2.462	1.45	1.948
3	4.55780205E+15	4.12980899E-07	0.05	2.275	1.46	1.958
3.12	4.74011413E+15	3.97097019E-07	0.05	2.07	1.47	1.952
3.25	4.93761888E+15	3.81213138E-07	0.05	1.864	1.46	1.933

Los resultados se dividen en varios casos escogidos en base a ciertas restricciones propuestas donde nos limitamos a cambiar los radios de las partículas sin modificar su posición. Esto es posible ya que el arreglo está restringido a un triángulo equilátero con una longitud de 60nm por lado, por lo que la distancia entre los centros de las nanopartículas es menor a 100nm que es el límite para la existencia de resonancias en el rango de luz visible (Stefan A. Maier, 2007). Por esta razón se estudiaron dos radios: 28 y 29nm, siendo 29nm como el máximo radio posible sin que las partículas se toquen. Esto ocasiona separaciones entre las superficies de las partículas de 4 y 2nm, respectivamente. Los resultados del presente trabajo se obtuvieron por medio del software COMSOL que, con la finalidad de corroborarlos, se compararon con los que se consiguieron por análisis numérico usando el método de la Matriz T en conjunto con los valores

dados en la Tabla 1. Es importante señalar que, además de los 8 casos aquí mostrados, se realizaron varios cálculos y simulaciones más pero las aquí mostradas son las más representativas.

4.1 Caso 1: Trímero de partículas de oro con 28nm de radio y una separación de 4nm entre las superficies de partículas contiguas iluminado con una onda plana polarizada linealmente a lo largo del eje-x:

4.1.1 Intensidad del campo eléctrico dispersado:

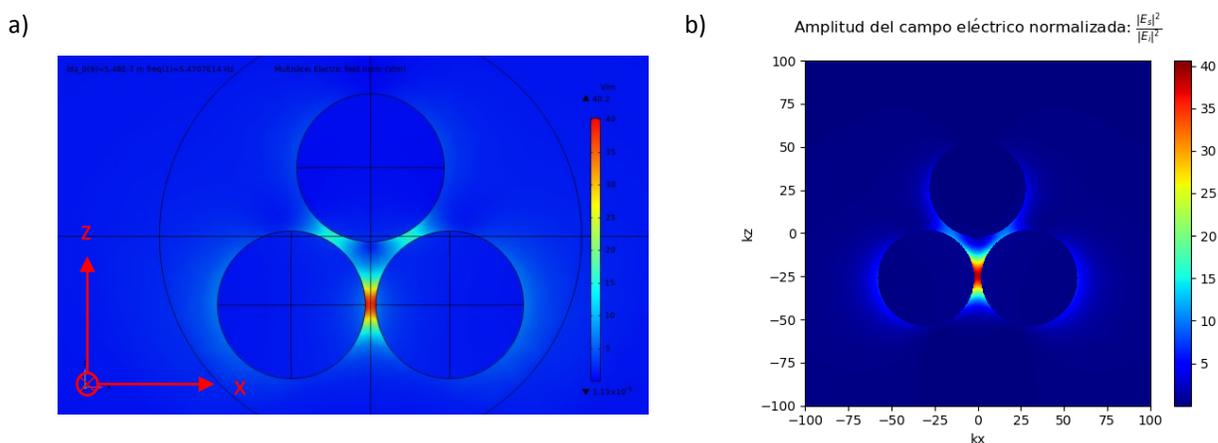


Figura 12. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 548nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.

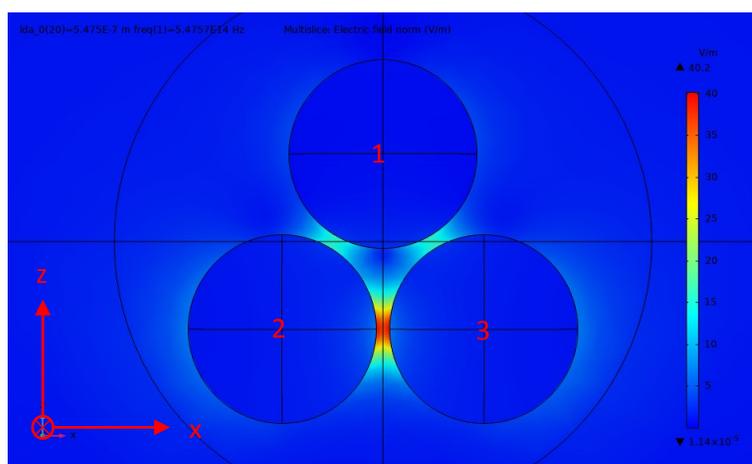
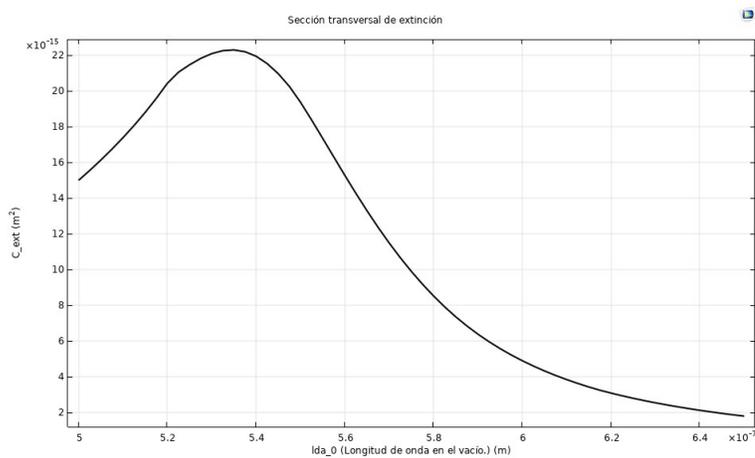


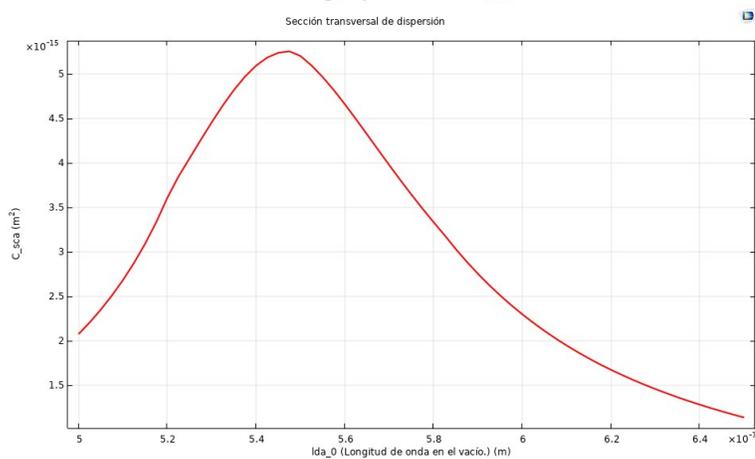
Figura 13. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 547.5nm calculada con COMSOL.

4.1.2 Cálculo de las secciones transversales como función de la longitud de onda incidente:

a)



b)



c)

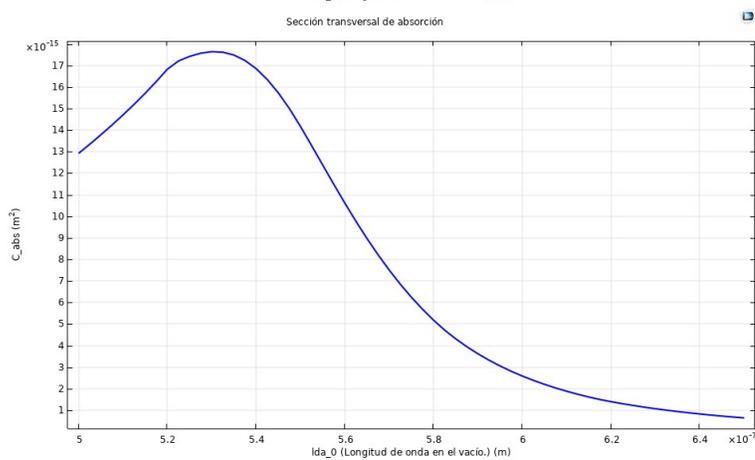


Figura 14. Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en x.

4.2 Caso 2: Trímero de partículas de oro con 28nm de radio y una separación de 4nm entre las superficies de partículas contiguas iluminado con una onda plana polarizada linealmente a lo largo del eje-z:

4.2.1 Intensidad del campo eléctrico dispersado:

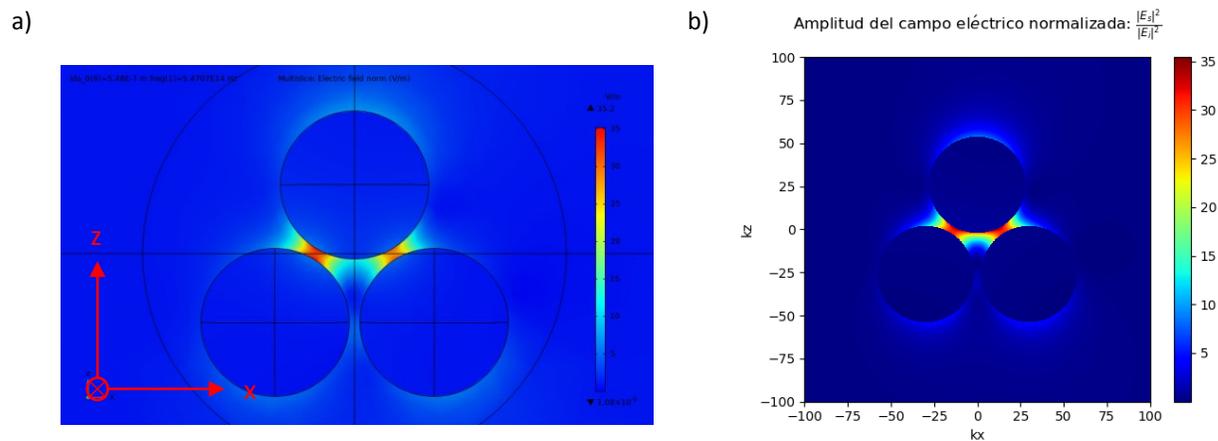


Figura 15. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 548nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.

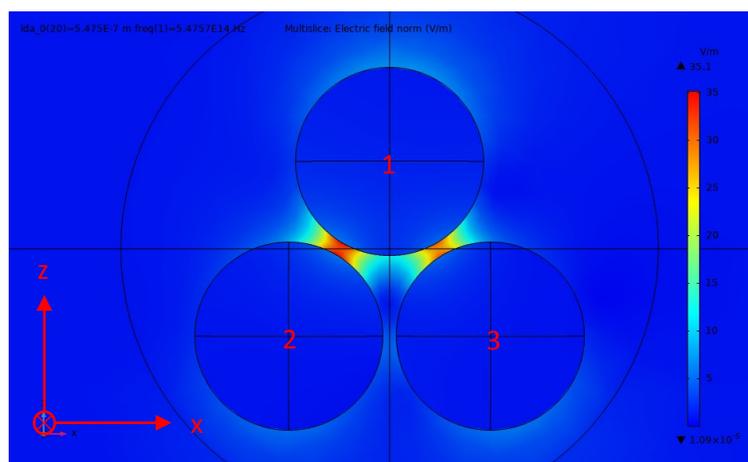
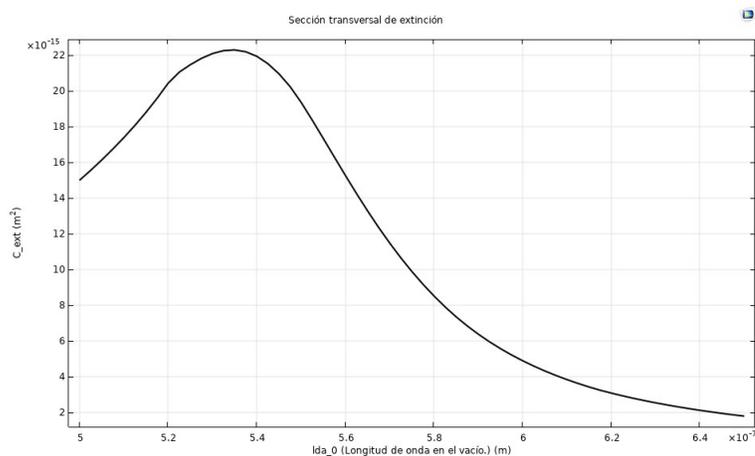


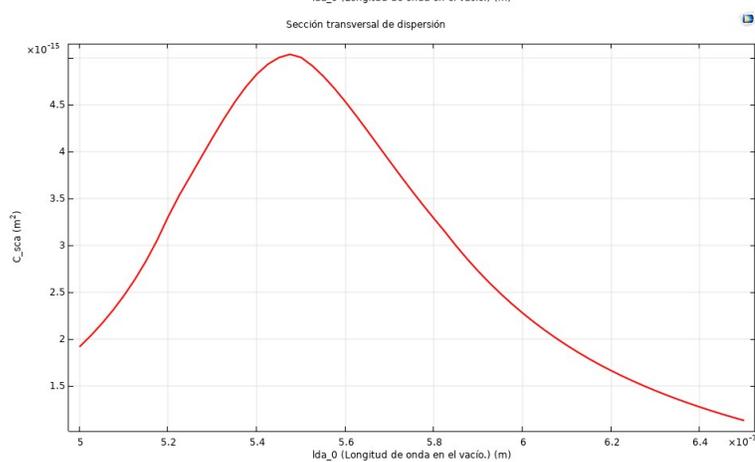
Figura 16. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 547.5nm calculada con COMSOL.

4.2.2 Cálculo de las secciones transversales como función de la longitud de onda incidente:

a)



b)



c)

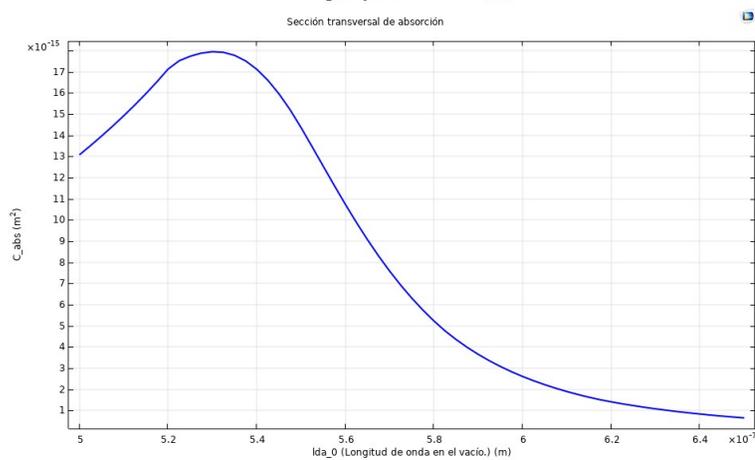


Figura 17. Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en z.

4.3 Caso 3: Trímero de partículas de oro con 29nm de radio y una separación de 2nm entre las superficies de partículas contiguas iluminado con una onda plana polarizada linealmente a lo largo del eje-x:

4.3.1 Intensidad del campo eléctrico dispersado:

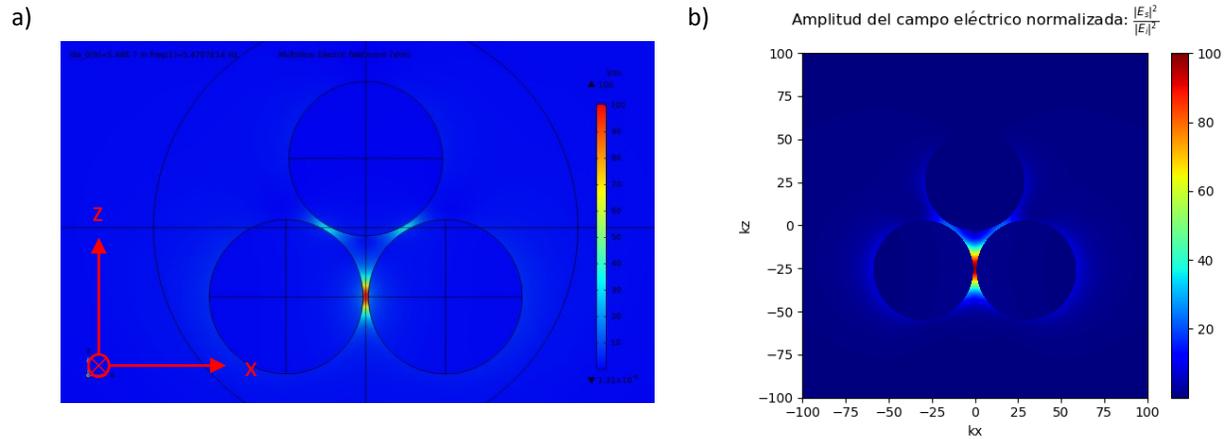


Figura 18. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 548nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.

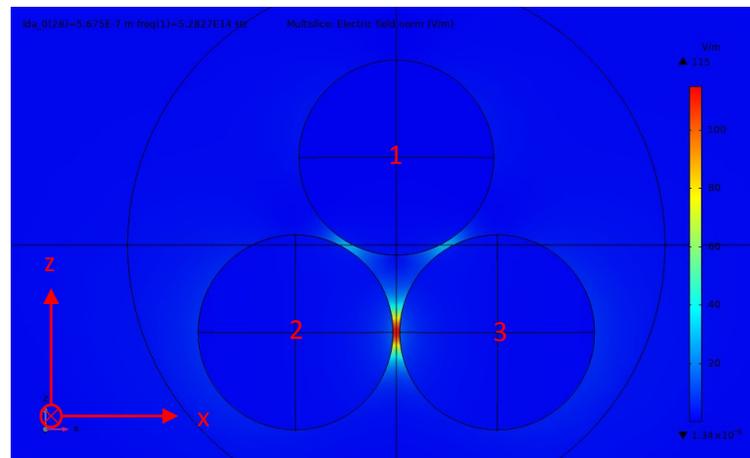
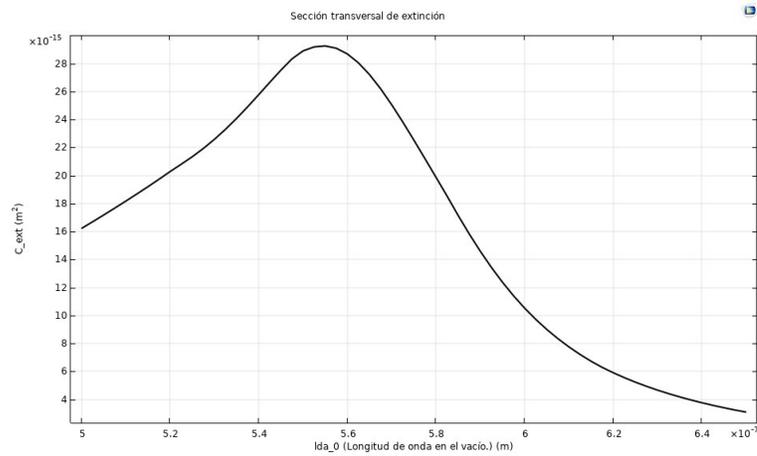


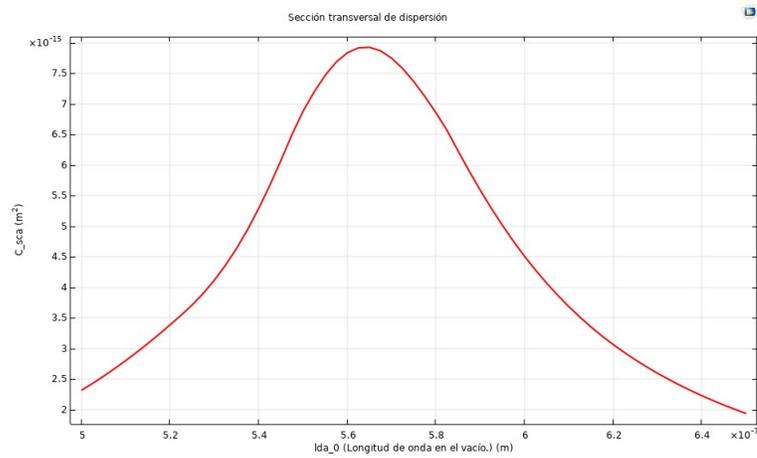
Figura 19. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 567.5nm calculada con COMSOL.

4.3.2 Cálculo de las secciones transversales como función de la longitud de onda incidente:

a)



b)



c)

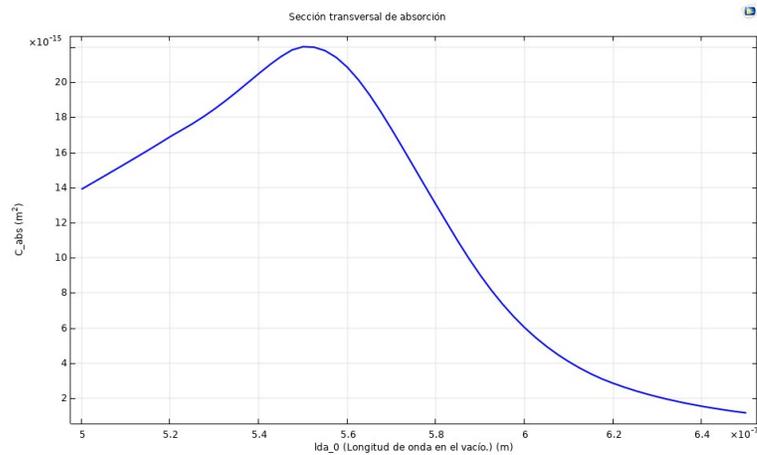


Figura 20. Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en x.

4.4 Caso 4: Trímero de partículas de oro con 29nm de radio y una separación de 2nm entre las superficies de partículas contiguas iluminado con una onda plana polarizada linealmente a lo largo del eje-z:

4.4.1 Intensidad del campo eléctrico dispersado:

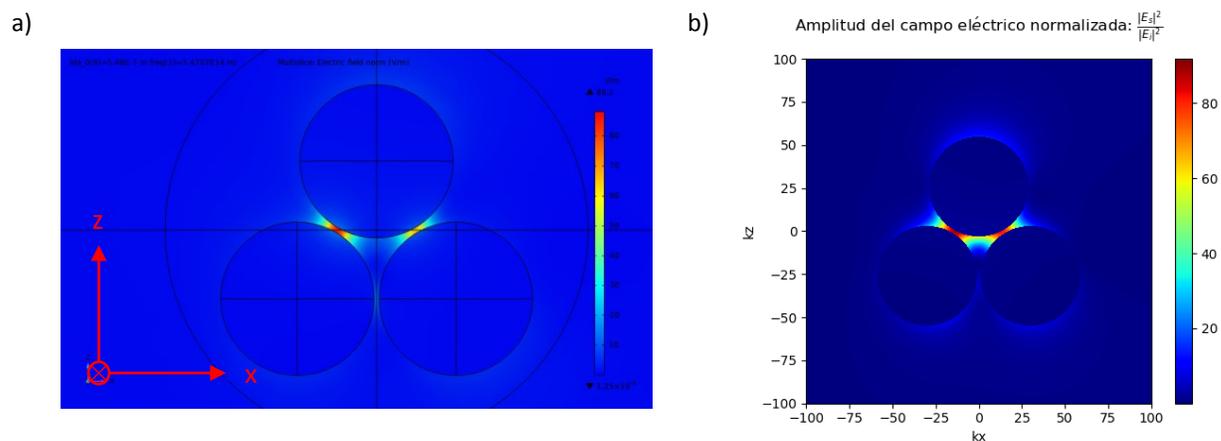


Figura 21. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 548nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.

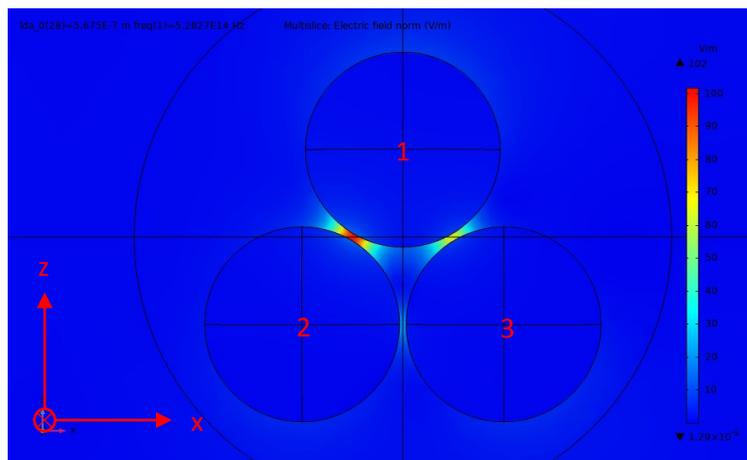
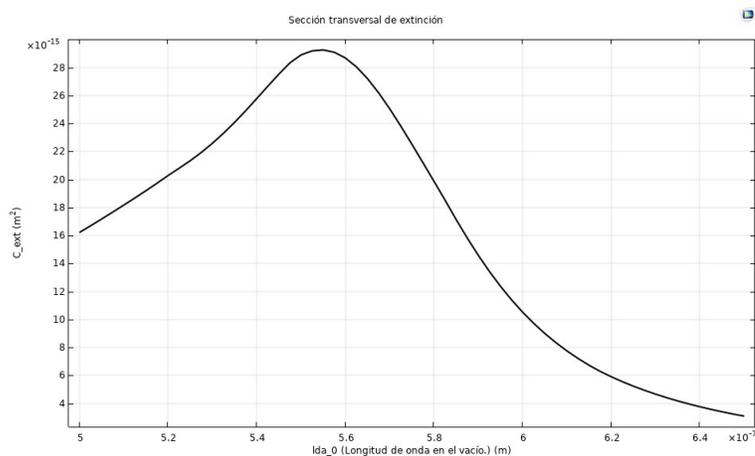


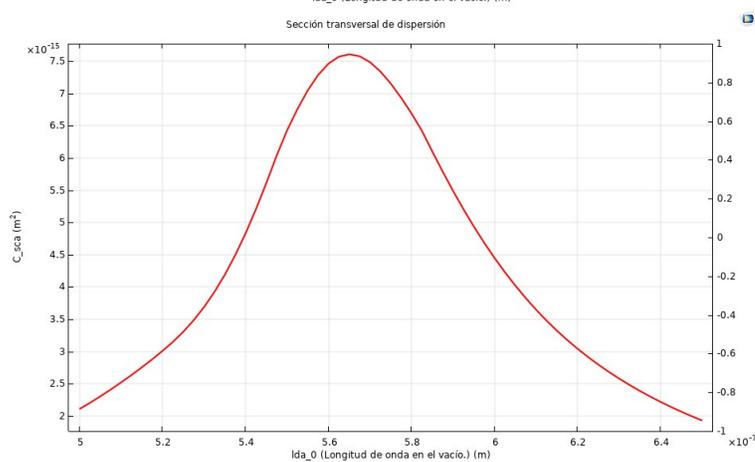
Figura 22. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 567.5nm calculada con COMSOL.

4.4.2 Cálculo de las secciones transversales como función de la longitud de onda incidente:

a)



b)



c)

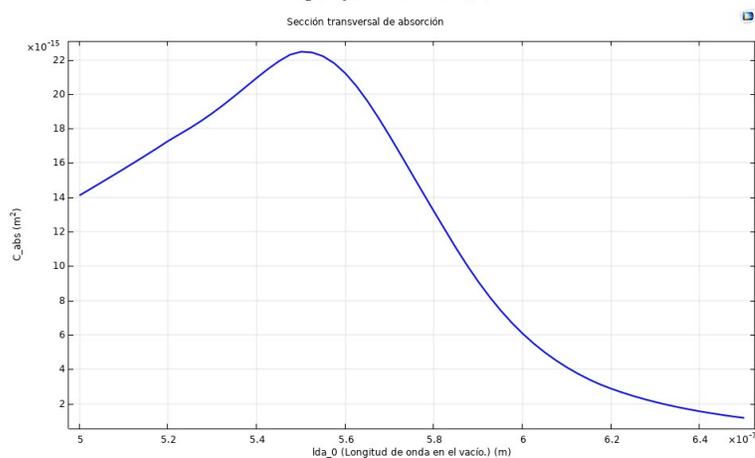


Figura 23. Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en z.

4.5 Caso 5: Trímero de partículas de plata con 28nm de radio y una separación de 4nm entre las superficies de partículas contiguas iluminado con una onda plana polarizada linealmente a lo largo del eje-x:

4.5.1 Intensidad del campo eléctrico dispersado:

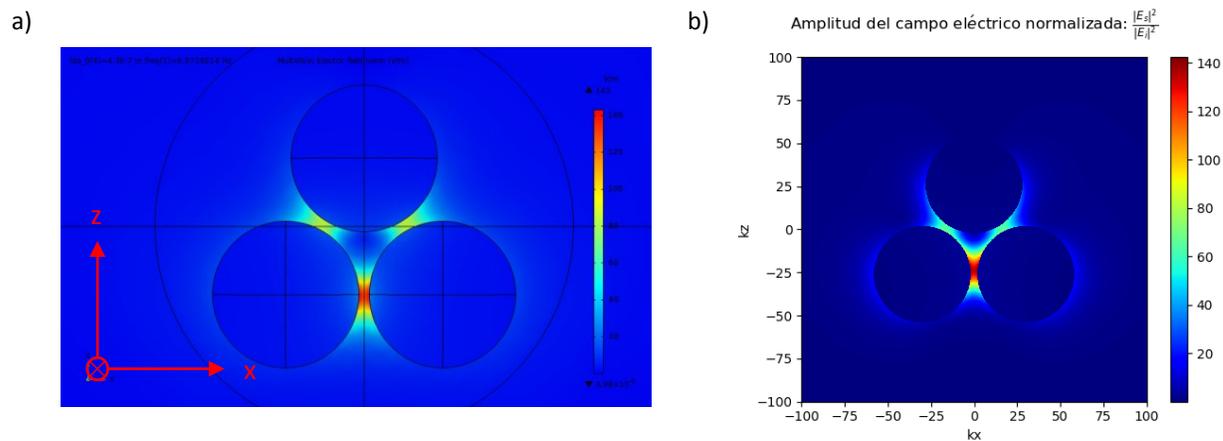


Figura 24. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 430nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.

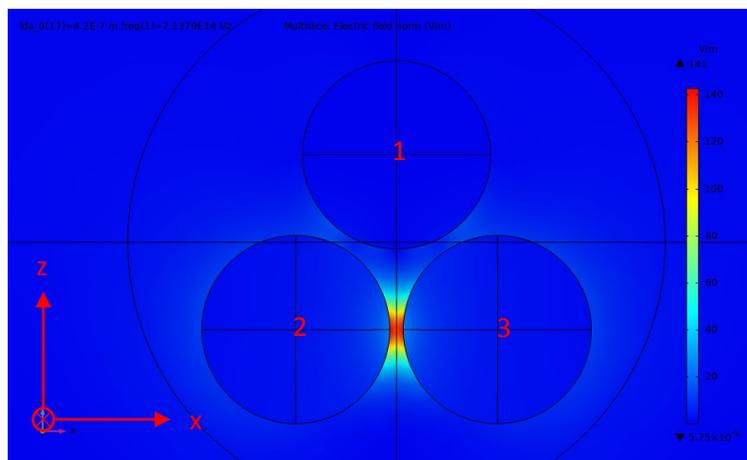


Figura 25. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 420nm calculada con COMSOL.

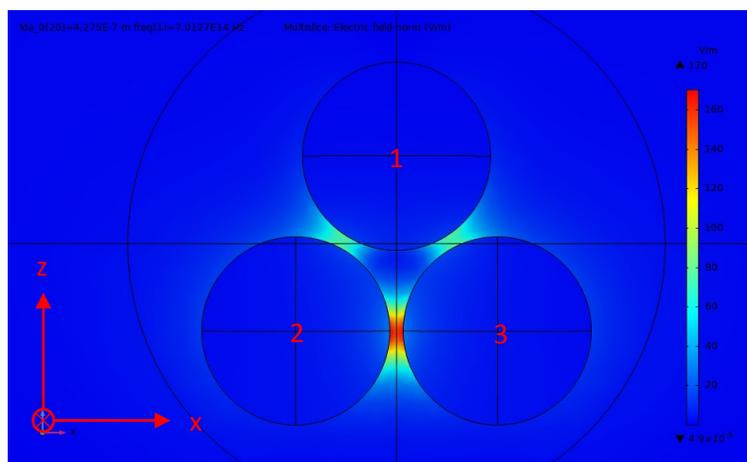
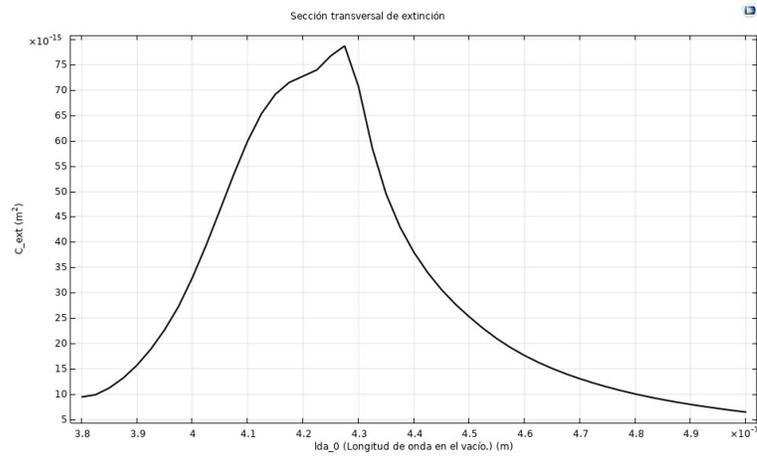


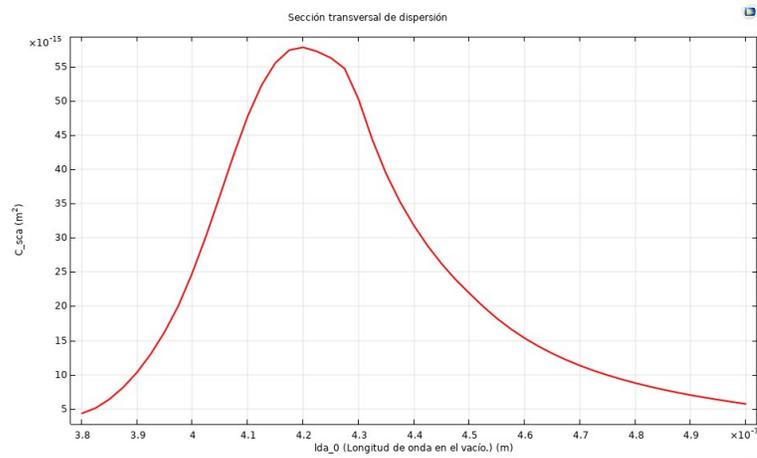
Figura 26. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 427.5nm calculada con COMSOL.

4.5.2 Cálculo de las secciones transversales como función de la longitud de onda incidente:

a)



b)



c)

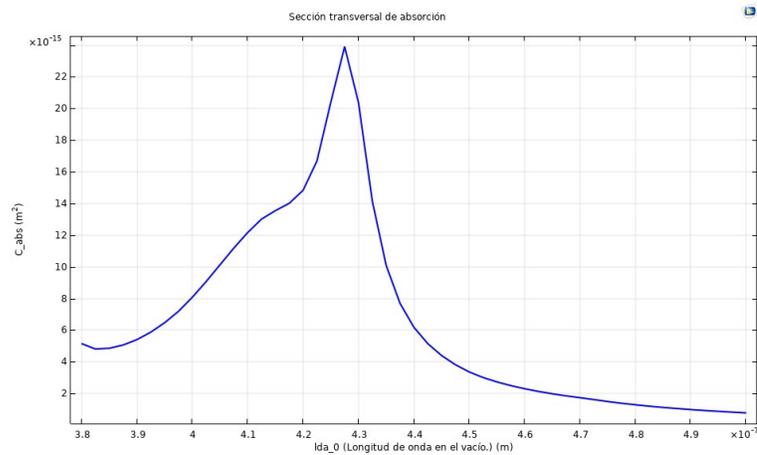


Figura 27. Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en x.

4.6 Caso 6: Trímero de partículas de plata con 28nm de radio y una separación de 4nm entre las superficies de partículas contiguas iluminado con una onda plana polarizada linealmente a lo largo del eje-z:

4.6.1 Intensidad del campo eléctrico dispersado:

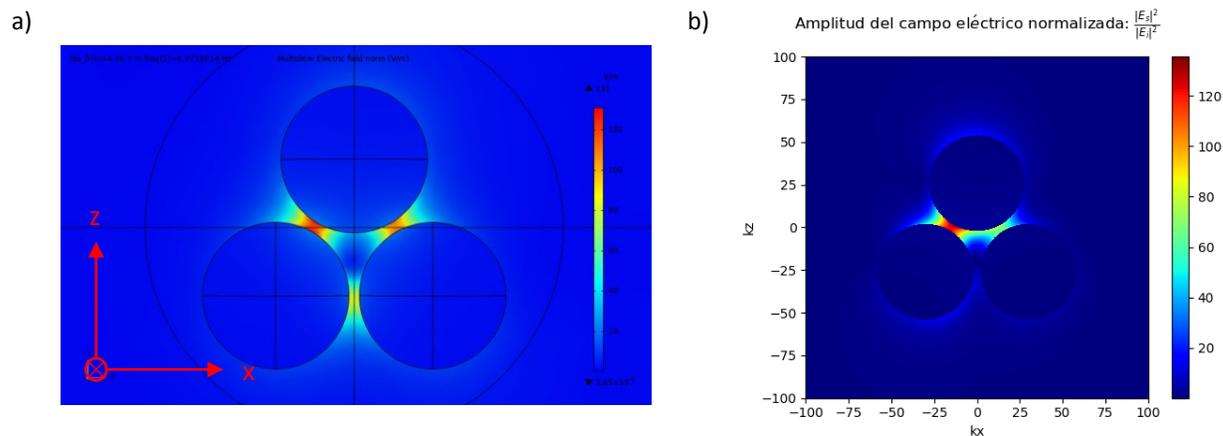


Figura 28. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 430nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.

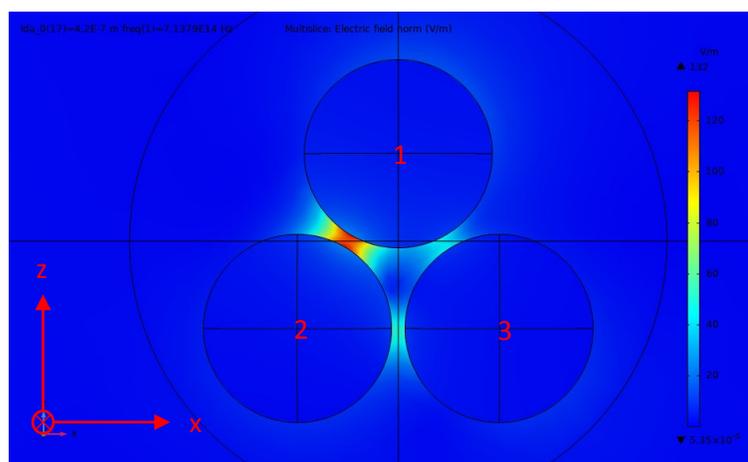


Figura 29. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 420nm calculada con COMSOL.

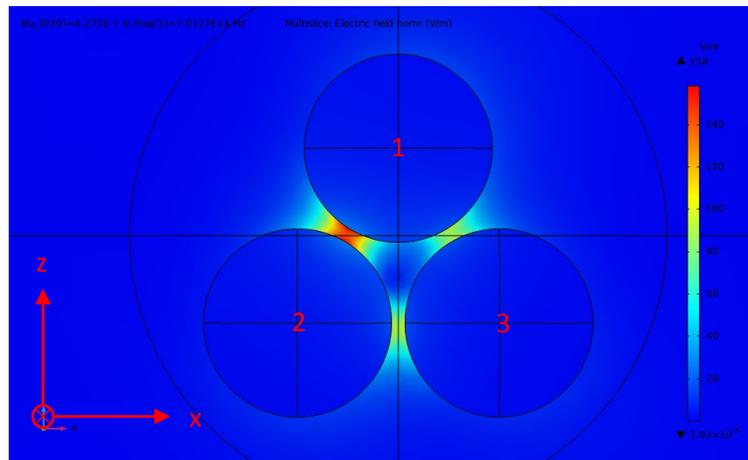
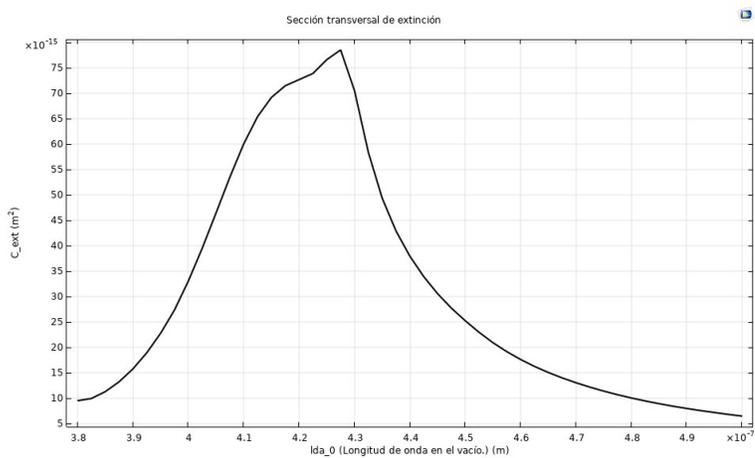


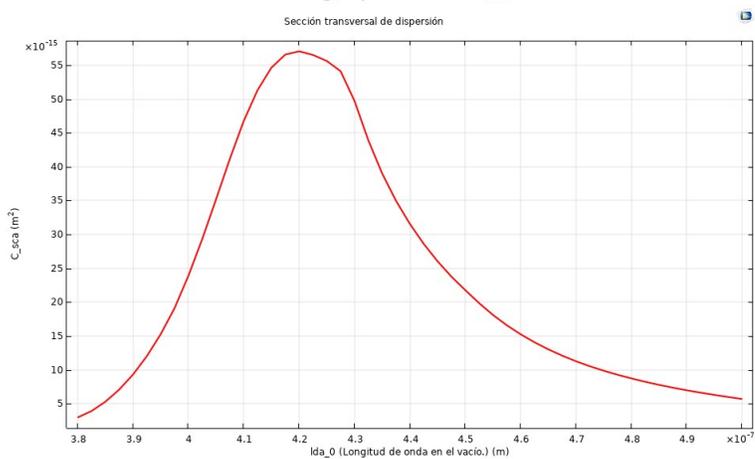
Figura 30. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 427.5nm calculada con COMSOL.

4.6.2 Cálculo de las secciones transversales como función de la longitud de onda incidente:

a)



b)



c)

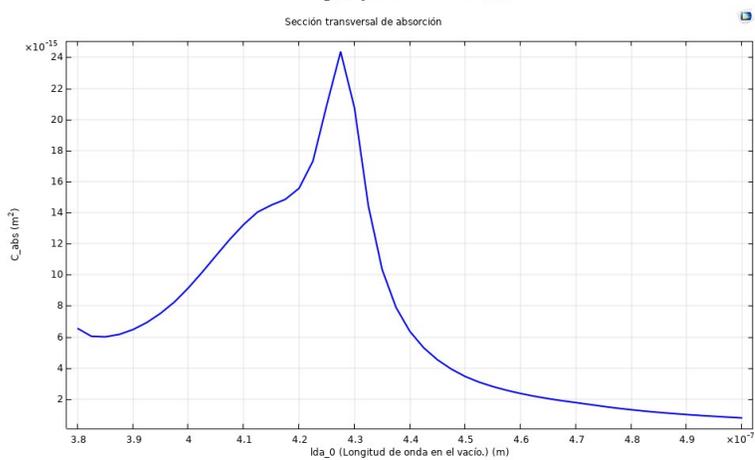


Figura 31. Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en z.

4.7 Caso 7: Trímero de partículas de plata con 29nm de radio y una separación de 2nm entre las superficies de partículas contiguas iluminado con una onda plana polarizada linealmente a lo largo del eje-x:

4.7.1 Intensidad del campo eléctrico dispersado:

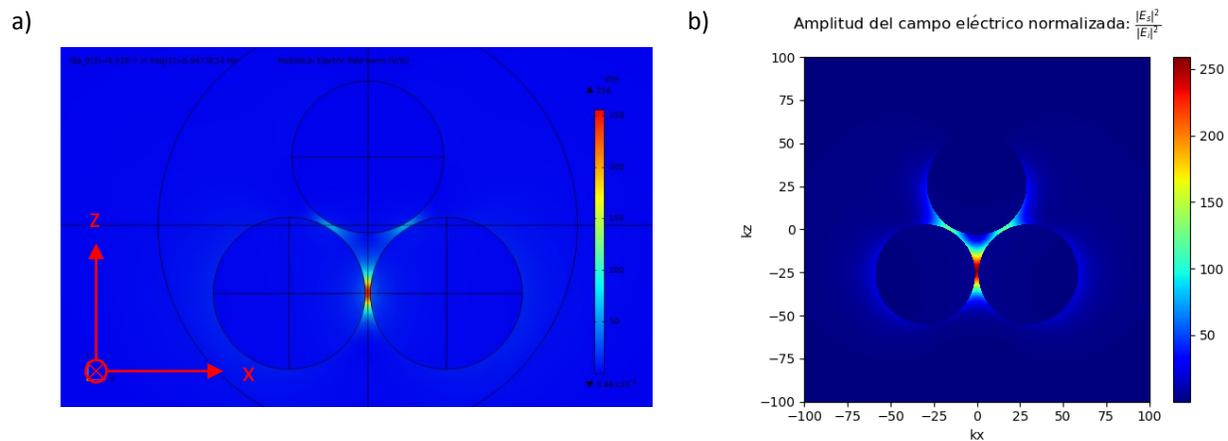


Figura 32. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 451nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.

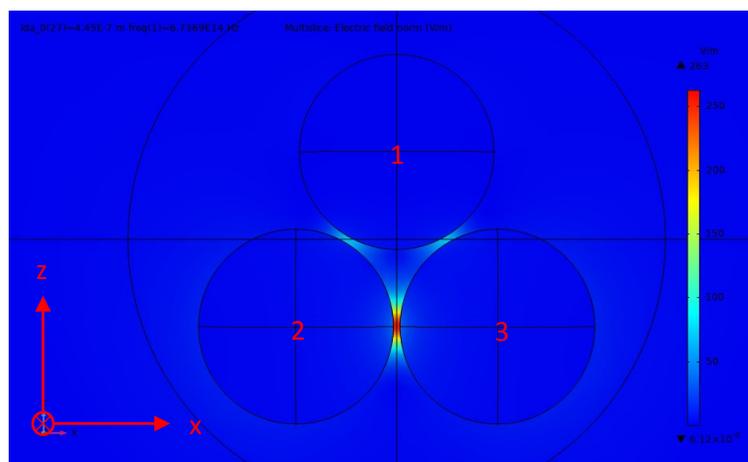


Figura 33. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 445nm calculada con COMSOL.

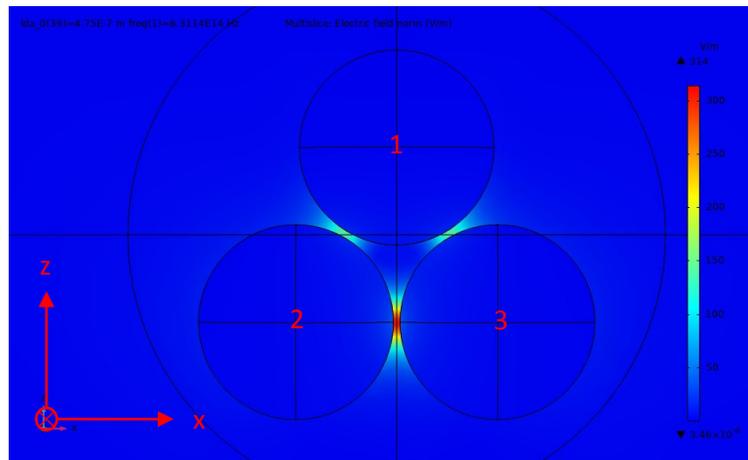
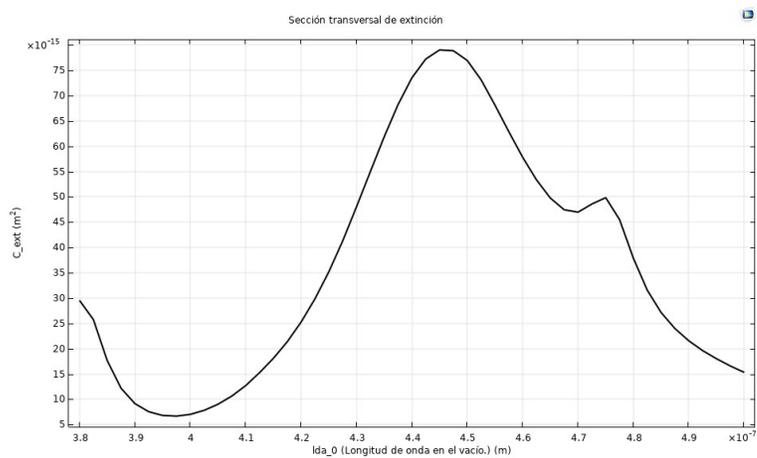


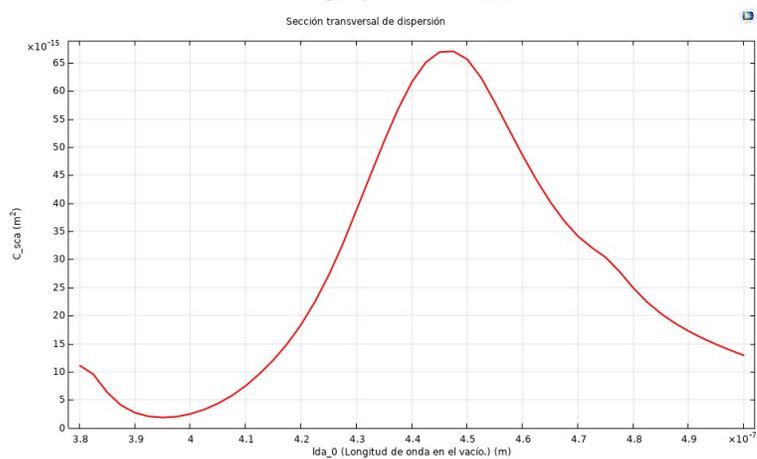
Figura 34. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 475nm calculada con COMSOL.

4.7.2 Cálculo de las secciones transversales como función de la longitud de onda incidente:

a)



b)



c)

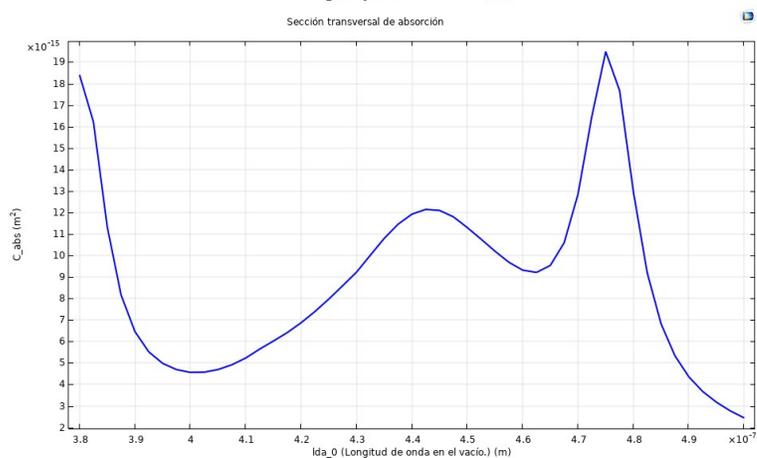


Figura 35. Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en x.

4.8 Caso 8: Trímero de partículas de plata con 29nm de radio y una separación de 2nm entre las superficies de partículas contiguas iluminado con una onda plana polarizada linealmente a lo largo del eje-z:

4.8.1 Intensidad del campo eléctrico dispersado:

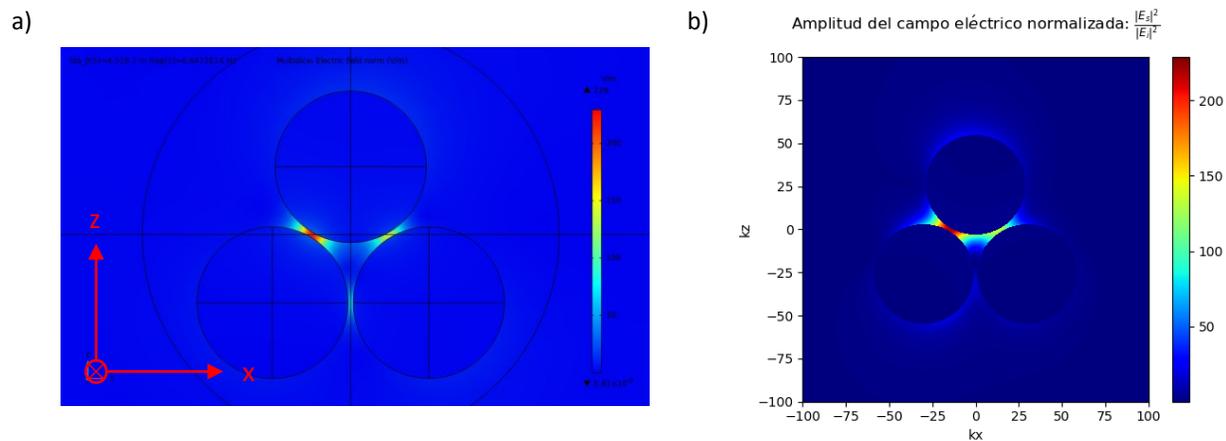


Figura 36. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 451nm calculada con a) COMSOL y b) Matriz T.

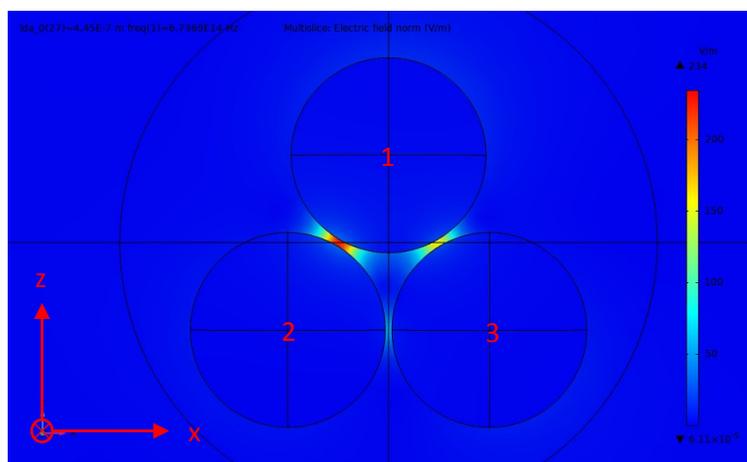


Figura 37. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 445nm calculada con COMSOL.

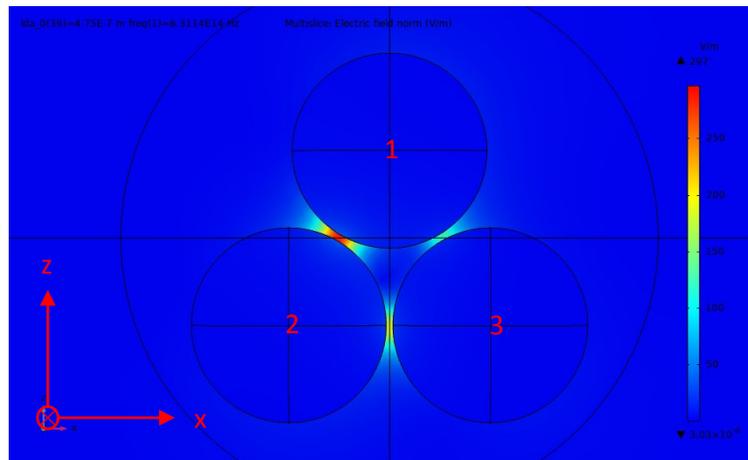
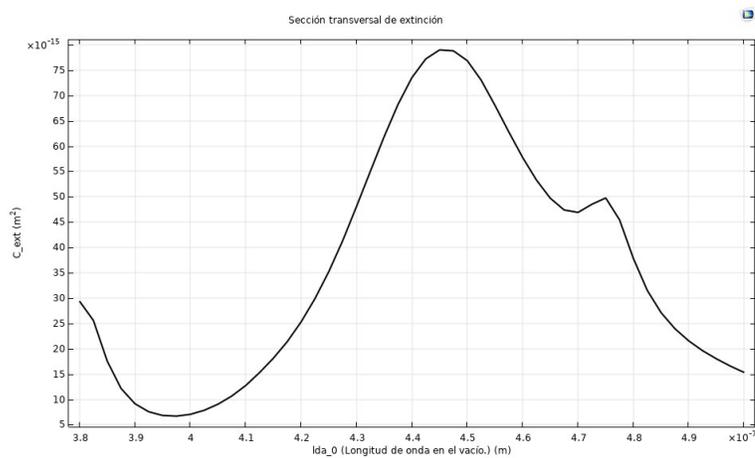


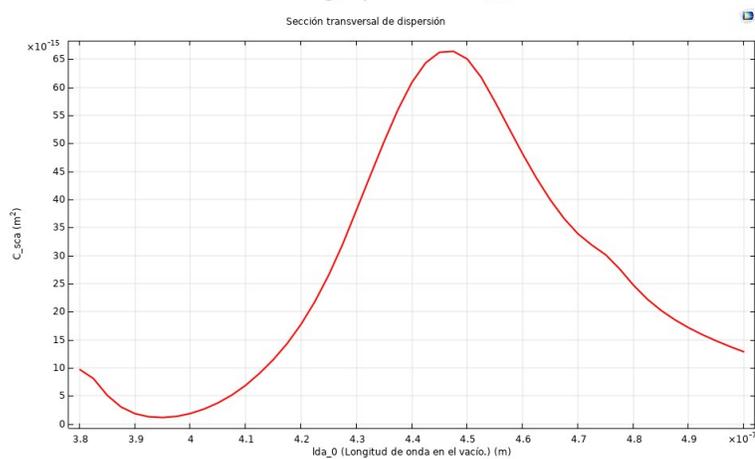
Figura 38. Intensidad del campo eléctrico dispersado para una longitud de onda de 475nm calculada con COMSOL.

4.8.2 Cálculo de las secciones transversales como función de la longitud de onda incidente:

a)



b)



c)

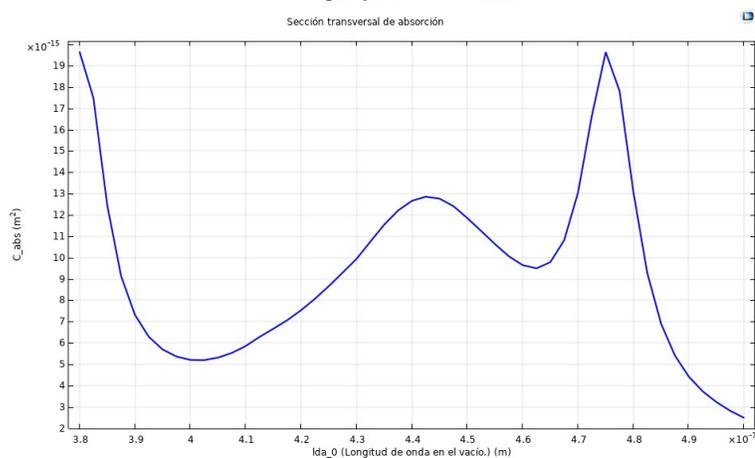


Figura 39. Cálculo con COMSOL de las secciones transversales de extinción, dispersión y absorción para un trímero de nanopartículas de oro dispuestas en forma de triángulo equilátero iluminado por una onda plana polarizada en z.

Capítulo 5. Discusión

En este capítulo se analizarán y compararán los resultados obtenidos en el capítulo anterior. Para ello, se discutirán primeramente los resultados obtenidos para oro (caso 1, 2, 3 y 4) y después se hará lo mismo para los correspondientes a plata (caso 5, 6, 7 y 8). Para facilitar el análisis, se resumen en la siguiente tabla los valores máximos de las secciones transversales y la longitud de onda correspondiente.

Tabla 2. Recopilación de los resultados obtenidos para las secciones transversales en todos los casos de estudio.

Casos	Polarización	C_{ext} - máx. ($\times 10^{-15} \text{ m}^2$)	Desviación estándar	C_{sca} - máx. ($\times 10^{-15} \text{ m}^2$)	Desviación estándar	C_{abs} - máx. ($\times 10^{-15} \text{ m}^2$)	Desviación estándar
Oro – 4nm	Eje-x	22 ($\lambda=530\text{nm}$)	grande	5.5 ($\lambda=547.5\text{nm}$)	grande	17.5 ($\lambda=530\text{nm}$)	grande
	Eje-z	22 ($\lambda=527.5\text{nm}$)	grande	5.5 ($\lambda=547.5\text{nm}$)	grande	17.5 ($\lambda=527.5\text{nm}$)	grande
Oro – 2nm	Eje-x	29 ($\lambda=555\text{nm}$)	grande	7.9 ($\lambda=567.5\text{nm}$)	grande	22 ($\lambda=555\text{nm}$)	grande
	Eje-z	29 ($\lambda=555\text{nm}$)	grande	7.9 ($\lambda=567.5\text{nm}$)	grande	22 ($\lambda=555\text{nm}$)	grande
Plata – 4nm	Eje-x	78 ($\lambda=427.5\text{nm}$)	grande	57 ($\lambda=420\text{nm}$)	pequeña	24 ($\lambda=427.5\text{nm}$)	grande
	Eje-z	78 ($\lambda=427.5\text{nm}$)	grande	57 ($\lambda=420\text{nm}$)	pequeña	24 ($\lambda=427.5\text{nm}$)	grande
Plata – 2nm	Eje-x	79 ($\lambda=445\text{nm}$)	grande	67 ($\lambda=445\text{nm}$)	pequeña	20 ($\lambda=475\text{nm}$)	grande
	Eje-z	79 ($\lambda=445\text{nm}$)	grande	67 ($\lambda=445\text{nm}$)	pequeña	20 ($\lambda=475\text{nm}$)	grande

De acuerdo con los datos de la tabla anterior, se observa que en los arreglos compuestos de oro domina la absorción, lo que implica que la mayor parte de la energía se disipa en la partícula. En la plata, por el contrario, la mayor parte de la energía se dispersa. Además, los valores de las secciones transversales son prácticamente independientes del estado de polarización de la luz incidente para todos los casos. Esto indica que la resonancia para este tipo de arreglos no depende del estado de polarización del material del que se conformen las partículas. Otro dato importante que se muestra en la tabla 2 es el hecho de que las gráficas de secciones transversales para oro y plata presentan una desviación estándar grande, es decir, las gráficas muestran un pico ancho, lo que implica una mayor incertidumbre en los resultados obtenidos. Hay que recordar que los datos para la parte real e imaginaria del índice de refracción utilizados en este trabajo se obtuvieron mediante una interpolación lineal de los datos experimentales de la tabla 1. Como en cualquier análisis, el grado de fluctuación de los valores promedio obtenidos, como la posición de los máximos, está relacionado con la interpolación de datos, como lo considerado en la Tabla 1, para los

cálculos hechos en el presente trabajo. Por lo tanto, en las observaciones posteriores tomaremos las longitudes de onda correspondientes a los valores máximos de las secciones transversales únicamente como punto de referencia. Ahora procedemos a analizar la distribución espacial del campo eléctrico para cada uno de los casos para conocer las regiones de máxima intensidad y su valor relativo.

El estudio de la intensidad del campo eléctrico para todos los casos se realizó para las longitudes de onda dadas en la Tabla 1 utilizando el método de la Matriz T y COMSOL. A partir de los resultados exhibidos en las figuras del capítulo anterior, se observa una gran similitud entre la distribución de los campos eléctricos obtenidos por el método de la Matriz T con los obtenidos con COMSOL para todos los casos. Por esta razón, procedemos a analizar los campos eléctricos asociados únicamente a la longitud de onda alrededor de la cual ocurre resonancia plasmónica, dados en la Tabla 2:

- i) En el caso 1 se aprecia un incremento en la intensidad del campo eléctrico dispersado, $|E_{dis}|$, de aproximadamente 40 veces con respecto a la intensidad del campo incidente, $|E_{inc}|$, para una longitud de onda de 547.5 nm, como se muestra en la Figura 13. Sin embargo, como se observa en la Figura 14, se observa una gran anchura en los picos en las curvas por lo que en este caso se estima que la resonancia se encuentra aproximadamente ± 20 nm alrededor del máximo indicado. A su vez se observa que el mayor confinamiento o "hot spot" se encuentra entre las partículas 2 y 3, como se muestra en la Figura 13.
- ii) En el caso 2 la resonancia se encuentra a la misma longitud de onda que en el caso 1, 547.5 ± 20 nm. En la Figura 16 podemos observar que el cociente $|E_{dis}| / |E_{inc}|$ aquí es aproximadamente de 35 veces. Sin embargo, se puede ver que la región de mayor intensidad se encuentra ahora entre las partículas 1 y 2, lo que nos indica que el estado de polarización, a pesar de no cambiar la longitud de onda a la que ocurre la resonancia, cambia la ubicación del "hot spot". Esto es de esperarse ya que el estado de polarización de la onda incidente es distinto a la del caso anterior.
- iii) Para los casos 3 y 4 podemos ver respuestas similares a la de los casos 1 y 2, respectivamente. Sin embargo, dada la menor separación entre partículas se observa un corrimiento hacia el rojo en la posición de la resonancia, como se muestra en la Tabla 2. Es decir, la longitud de onda aumenta para el valor máximo de las secciones transversales. Además, se aprecia un incremento en los valores de las secciones transversales tanto de absorción como de dispersión. Para los casos 3 y 4, analizando las figuras 19 y 22, se tiene un incremento de $|E_{dis}|$ aproximadamente de 115 y 102 veces, respectivamente, mayor que $|E_{inc}|$ para una longitud de onda de aproximadamente 567.5 ± 20 nm. En ambos casos también se está considerando que la incertidumbre de la posición del valor máximo es igual al dado en i) y ii) ya que la

forma de las curvas obtenidas en estos cuatro casos es similar. Además, podemos ver también de las figuras 19 y 22 que la distribución del campo eléctrico dispersado en los casos 3 y 4 concuerda a las descritas anteriormente para los casos 1 y 2, respectivamente. De esta información podemos deducir que el oro sigue un comportamiento muy parecido independientemente del radio de las partículas, mostrando únicamente incrementos en su intensidad y un corrimiento al rojo al disminuir la separación entre las mismas, tendencia semejante a lo que ocurre para dímeros de oro (Coronado et al., 2011; Myroshnychenko et al., 2008).

Para nanopartículas compuestas de plata se observan comportamientos distintos a los de oro. En primer lugar, existen dos picos para las secciones transversales, como se ve de las gráficas correspondientes en el capítulo de resultados. En los valores de la tabla 2 para plata está indicado solo el mayor de estos picos. Así como se hizo para oro, a continuación se harán las observaciones para los diversos casos de plata:

iv) De la Tabla 2, observamos que la máxima dispersión para el caso 5 se encuentra a una longitud de onda de 420 nm aproximadamente. En este caso se aprecia una incertidumbre de ± 15 nm, valor menor que en los casos anteriores, alrededor del pico máximo. Por otra parte, la máxima absorción se encuentra en 427.5 ± 10 nm. Por lo anterior, no es de extrañar que a pesar de que $|E_{dis}|/|E_{inc}|$ aparentemente sea mayor para una longitud de onda de 427.5 nm, ver figura 26, que para una longitud de 420 nm, ver figura 25, es difícil afirmar que esto ocurre así ya que las curvas de sección transversal correspondientes para ambos casos son anchas alrededor del valor máximo. Por lo tanto, se conjetura que el valor máximo debe encontrarse en un rango aproximado de 415 a 435 nm debido a la incertidumbre en la posición de ambos picos. De la figura 26 se observa una distribución parecida a la del caso 1, donde la máxima intensidad se encuentra entre las partículas 2 y 3. Para el caso 6 tenemos algo similar al caso 5, de acuerdo a los datos mostrados en la Tabla 2. Sin embargo, la ubicación del "hot spot", se encuentra en la separación entre las partículas 1 y 2.

v) En el caso 7 y 8 observamos un comportamiento semejante a los casos 5 y 6, respectivamente. Aquí también vemos que ocurre un corrimiento hacia el rojo en los máximos de las secciones transversales y un incremento en la intensidad de $|E_{dis}|$ dada la menor separación entre partículas. En estos casos, los picos en las gráficas de las secciones transversales se aprecian más definidos en comparación con los picos de los casos 5 y 6. Esto se debe a que, en el estudio con plata, la interacción multipolar (cuadruolos, octupolos, etc.) se vuelve más importante conforme se reduce la separación entre partículas (Coronado et al., 2011). Dicho lo anterior, podemos asociar los distintos picos en las gráficas de secciones transversales a resonancias multipolares. Para estos casos se supone que el máximo se encuentra en un

rango aproximado de 435 a 455 nm debido a la anchura de las curvas de secciones transversales, ver Figura 35. Finalmente, podemos notar que la máxima intensidad de $|E_{\text{dis}}|$ se encuentra entre las partículas 2 y 3 para el caso 7 y entre las partículas 1 y 2 para el caso 8 al observar las Figuras 34 y 38, respectivamente.

Capítulo 6. Conclusiones

Se realizó el estudio del análisis numérico y simulación por medio de la matriz T y COMSOL, respectivamente, de la resonancia plasmónica de un arreglo de tres nanopartículas colocadas de manera tal que conforman un triángulo equilátero con nanopartículas de dos materiales distintos. Los radios de las nanopartículas se variaron desde su tamaño original, 5nm, hasta aquellos valores que hicieron que la interferencia constructiva de los plasmones del arreglo fuera máxima bajo el límite de que la distancia entre los centros no fuera mayor a 60 nm. Esta restricción en el tamaño del triángulo hizo que el estudio presente tuviera sentido cuando el rango de longitudes de onda fuera en el visible, 380 a 700 nm aproximadamente, si las ondas electromagnética se desplazan en un medio no absorbente, aire, e inciden bajo dos estados de polarización distintos. A continuación se enlistan las conclusiones más relevantes:

- Se encontró que los resultados más destacables para oro y plata se obtuvieron cuando las separaciones entre partículas eran de 4 y 2nm correspondientes a radios de 28 y 29nm, respectivamente. Por lo tanto, una menor separación implica campos dispersados más intensos y concentrados en regiones más pequeñas. A su vez, esto ocasiona un corrimiento en la resonancia que ocurre hacia el rojo en ambos materiales.
- Los resultados muestran que la interacción dipolar es la dominante cuando las partículas están compuestas de oro, incluso para separaciones pequeñas. Por otra parte, al reducir la separación entre partículas compuestas de plata la interacción multipolar se vuelve más significativa. Esto en gran parte debido a que la plata presenta una mayor polarizabilidad eléctrica que el oro.
- Debido a la mayor polarizabilidad eléctrica, se observa que los arreglos de nanopartículas compuestas de plata presentan un campo eléctrico dispersado más intenso que el correspondiente a oro.
- Para todos los casos, la máxima intensidad $|E_{dis}|$ depende del estado de polarización. De manera tal que es ligeramente menor cuando el campo incidente esta polarizado en z que aquel en que está polarizado en x.
- En los arreglos hechos con plata la dispersión es la que domina, mientras que absorción es el fenómeno principal para oro en todos los casos.
- Los resultados aquí obtenidos concuerdan con el estudio reportado en la literatura por Lev Chuntonov *et al.* (Chuntonov y Haran, 2011) para determinar que las resonancias plasmónicas para un arreglo triangular son independientes del estado de polarización de la luz incidente.

- De acuerdo con los resultados obtenidos, podemos afirmar que el estudio por simulación numérica de un arreglo conformado por tres nanopartículas colocadas en los vértices de un triángulo equilátero es una guía confiable para confirmar posteriormente que este arreglo tiene las propiedades aquí mostradas en un estudio experimental. Esto debido a que proporciona la ubicación de las regiones de máxima intensidad, o “hot spots”, con una incertidumbre pequeña.
- Finalmente, concluimos que una aplicación sobresaliente para este arreglo es el mejoramiento en la eficiencia de celdas solares debido la invariancia que presenta con respecto al estado de polarización, lo que sería una gran ventaja recordando que el sol es un claro ejemplo de una fuente de luz no polarizada.

Literatura citada

- Arfken, G., Mathews, J. 1972. Mathematical Methods for Physicists. *American Journal of Physics*, 40(4), 642–642. doi:10.1119/1.1988084
- Ashcroft, N., Mermin, N. 1976. Solid State Physics. *Solid State Physics*, 451–469. doi:10.1007/978-3-540-93804-0
- Bharadwaj, P., Deutsch, B., Novotny, L. 2009. Optical Antennas. *Advances in Optics and Photonics*, 1(3), 438. doi:10.1364/AOP.1.000438
- Biagioni, P., Huang, J.-S., Hecht, B. 2011. Nanoantennas for visible and infrared radiation. *Reports on Progress in Physics*, 75(2), 024402. doi:10.1088/0034-4885/75/2/024402
- Bohren, Craig F, Huffman, D. R. 1983. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. En Wiley, NY. Wiley.
- Camacho B., A. S. 2012. Acoplamiento de Plasmones Localizados en Nanosistemas. *Rev. Acad. Colombi. Cienc.*, XXXVI, 15–24. de <http://www.scielo.org.co/pdf/racefn/v36n138/v36n138a02.pdf>
- Chuntonov, L., Haran, G. 2011. Trimeric Plasmonic Molecules: The Role of Symmetry. *Nano Letters*, 11(6), 2440–2445. doi:10.1021/nl2008532
- Coronado, E. A., Encina, E. R., Stefani, F. D. 2011. Optical properties of metallic nanoparticles: Manipulating light, heat and forces at the nanoscale. *Nanoscale*, 3(10), 4042–4059. doi:10.1039/c1nr10788g
- Garcia, M. A. 2011. Surface plasmons in metallic nanoparticles: Fundamentals and applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 44. doi:10.1088/0022-3727/44/28/283001
- Johnson, P. B., Christy, R. W. 1972. Optical constants of the noble metals. *Physical Review B*, 6(12), 4370–4379. doi:10.1103/PhysRevB.6.4370
- Li, M., Cushing, S. K., Wu, N. 2015, diciembre 15. Plasmon-enhanced optical sensors: A review. *Analyst*, Vol. 140. doi:10.1039/c4an01079e
- Mackowski, D. W., Mishchenko, M. I. 2011. A multiple sphere T-matrix Fortran code for use on parallel computer clusters. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(13), 2182–2192. doi:10.1016/j.jqsrt.2011.02.019
- Mackowski, Daniel W. 1994. Calculation of total cross sections of multiple-sphere clusters. *Journal of the Optical Society of America A*, 11(11), 2851. doi:10.1364/JOSAA.11.002851
- Maier, S. A., Brongersma, M. L., Kik, P. G., Meltzer, S., Requicha, A. A. G., Atwater, H. A. 2001. Plasmonics - A route to nanoscale optical devices. *Advanced Materials*, 13(19), 1501–1505. doi:10.1002/1521-4095(200110)13:19<1501::AID-ADMA1501>3.0.CO;2-Z
- Maier, Stefan A. 2007. Plasmonics : fundamentals and applications. Springer.

- Mishchenko, M. I., Travis, L. D., Lacis, A. A. 2006. Multiple Scattering of Light by Particles: Radiative Transfer and Coherent Backscattering. En Book. de https://books.google.com.mx/books/about/Multiple_Scattering_of_Light_by_Particle.html?id=ODfEI-2ykLsC&redir_esc=y
- Mishchenko, M. I., Videen, G., Babenko, V. A., Khlebtsov, N. G., Wriedt, T. 2004. T-matrix theory of electromagnetic scattering by particles and its applications: A comprehensive reference database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 88(1–3), 357–406. doi:10.1016/j.jqsrt.2004.05.002
- Murray, W. A., Barnes, W. L. 2007. Plasmonic materials. *Advanced Materials*, Vol. 19. doi:10.1002/adma.200700678
- Myroshnychenko, V., Rodríguez-Fernández, J., Pastoriza-Santos, I., Funston, A. M., Novo, C., Mulvaney, P., Liz-Marzán, L. M., García De Abajo, F. J. 2008. Modelling the optical response of gold nanoparticles. *Chemical Society Reviews*, Vol. 37. doi:10.1039/b711486a
- Novotny, L., Hecht, B. 2009. Principles of nano-optics. En *Principles of Nano-Optics* (Vol. 9781107005). doi:10.1017/CBO9780511794193
- Rothmund, P. W. K. 2006, marzo 16. Folding DNA to create nanoscale shapes and patterns. *Nature*, Vol. 440. doi:10.1038/nature04586
- Samano, E. 2012. Papirolas y nanoelectrónica. *Ciencia y Desarrollo*. de <http://www.cyd.conacyt.gob.mx/261/articulos/papirolas-y-nanoelectronica.html>
- Sciau, P. 2012. Nanoparticles in Ancient Materials: The Metallic Lustre Decorations of Medieval Ceramics. En *The Delivery of Nanoparticles*. doi:10.5772/34080
- Seeman, N. C. 1982. Nucleic acid junctions and lattices. *Journal of Theoretical Biology*, 99(2), 237–247. doi:10.1016/0022-5193(82)90002-9
- Seeman, N. C. 2004. Nanotechnology and the double helix. *Scientific American*, Vol. 290. doi:10.1038/scientificamerican0604-64
- Stockman, M. I. 2011. Nanoplasmonics: The physics behind the applications. *Physics Today*, 64(2), 39–44. doi:10.1063/1.3554315
- Stockman, M., Pandey, L., George, T. 1996. Inhomogeneous localization of polar eigenmodes in fractals. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 53(5), 2183–2186. doi:10.1103/PhysRevB.53.2183
- Waterman, P. C. 1965. Matrix Formulation of Electromagnetic Scattering. *Proceedings of the IEEE*, 53(8), 805–812. doi:10.1109/PROC.1965.4058
- Watson, G. N. (George N. 1995. A treatise on the theory of Bessel functions. de https://books.google.com.mx/books/about/A_Treatise_on_the_Theory_of_Bessel_Funct.html?id=MIk3FrNoEVoC&redir_esc=y
- Xavier, P. L., Chandrasekaran, A. R. 2018, enero 10. DNA-based construction at the nanoscale: Emerging trends and applications. *Nanotechnology*, Vol. 29. doi:10.1088/1361-6528/aaa120

Zhang, J., Zhang, L., Xu, W. 2012, marzo 21. Surface plasmon polaritons: Physics and applications. Journal of Physics D: Applied Physics, Vol. 45. doi:10.1088/0022-3727/45/11/113001

Anexos

Anexo A: Construcción de los armónicos esféricos vectoriales

Un campo electromagnético armónico en el tiempo físicamente realizable (\mathbf{E}, \mathbf{H}) en un medio lineal, isotrópico y homogéneo debe satisfacer la ecuación de onda

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \quad \nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0, \quad (1)$$

donde $k = \omega^2 \mu \epsilon$, y estar libre de divergencias

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (2)$$

Además, \mathbf{E} y \mathbf{H} no son independientes:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E}. \quad (3)$$

Supongamos que, dada una función *escalar* ψ y un vector *constante* arbitrario \mathbf{c} , construimos una función vectorial \mathbf{M} :

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\psi). \quad (4)$$

La divergencia del rotacional de cualquier función vectorial es igual a cero, por lo tanto

$$\nabla \cdot \mathbf{M} = \nabla \cdot [\nabla \times (\mathbf{c}\psi)] = 0. \quad (5)$$

Si usamos algunas identidades vectoriales, obtenemos

$$\nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M} = \nabla \times [\mathbf{c}(\nabla^2 \psi + k^2 \psi)]. \quad (6)$$

Por lo tanto, \mathbf{M} satisface la ecuación de onda vectorial si ψ es una solución a la ecuación de onda escalar

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0. \quad (7)$$

También podemos escribir $\mathbf{M} = -\mathbf{c} \times (\nabla\psi)$, que muestra que \mathbf{M} es perpendicular a \mathbf{c} . Construyamos a partir de \mathbf{M} otra función vectorial

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k} \quad (8)$$

con divergencia igual a cero, que también satisface la ecuación de onda vectorial

$$\nabla^2 \mathbf{N} + k^2 \mathbf{N} = 0. \quad (9)$$

También tenemos

$$\nabla \times \mathbf{N} = k\mathbf{M}. \quad (10)$$

Por lo tanto, \mathbf{M} y \mathbf{N} tienen todas las propiedades requeridas de un campo electromagnético: satisfacen la ecuación de la onda vectorial, están libres de divergencia, el rotacional de \mathbf{M} es proporcional a \mathbf{N} y el rotacional de \mathbf{N} es proporcional a \mathbf{M} . Por lo tanto, el problema de encontrar soluciones a las ecuaciones de campo se reduce al problema relativamente simple de encontrar soluciones a la ecuación de onda escalar. Llamaremos a la función escalar ψ una *función generadora* para los *armónicos vectoriales* \mathbf{M} y \mathbf{N} ; el vector \mathbf{c} a veces se llama el *vector guía* o *piloto* (Bohren, Craig F, Huffman, 1983).

La elección de las funciones generadoras está dictada por cualquier simetría que pueda existir en el problema. Nos interesa la dispersión por una esfera; por lo tanto, elegimos las funciones ψ que satisfacen la ecuación de onda en coordenadas polares esféricas r, θ, ϕ . La elección del vector piloto es algo menos obvio. Podríamos elegir algún vector arbitrario \mathbf{c} . Sin embargo, si tomamos

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi), \quad (11)$$

donde \mathbf{r} es el vector de radio, entonces \mathbf{M} es una solución a la ecuación de onda vectorial en coordenadas polares esféricas. En problemas que involucran simetría esférica, por lo tanto, tomaremos \mathbf{M} dada en (11) y el \mathbf{N} asociado como nuestras soluciones fundamentales para las ecuaciones de campo. Tenga en cuenta que \mathbf{M} está en todas partes tangencial a cualquier esfera $|\mathbf{r}| = \text{constante}$ (es decir, $\mathbf{r} \cdot \mathbf{M} = 0$). La ecuación de onda escalar en coordenadas polares esféricas es

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + k^2 \psi = 0 \quad (12)$$

Utilizando el método de separación de variables, buscamos soluciones particulares a (12) de la forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \quad (13)$$

Si sustituimos (13) en (12) tenemos

$$\frac{\Theta(\theta)\Phi(\phi)}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{R(r)\Phi(\phi)}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{R(r)\Theta(\theta)}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} + k^2 \psi = 0. \quad (14)$$

El siguiente paso es dividir la ecuación (14) entre (13), con esto dejamos cada termino dependiente de una de las funciones que conforman (13) y a su vez nos indica que nuestras soluciones no pueden ser igual a cero. Al realizar este paso la ecuación resulta

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2 R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta \Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) \\ + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta \Phi(\phi)} \frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} + k^2 = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

De la ecuación (15) podemos apreciar que los tres primeros términos deben ser iguales a $-k^2$ que es una constante, por lo que cada uno de estos debe ser, a su vez, una constante, lo que permite resolver cada una de estas partes de manera individual. Si nos centramos en el tercer término de (15) vemos que requerimos multiplicar toda la ecuación por el factor $r^2 \sin^2 \theta$ para que todas sus componentes dependan únicamente de la variable ϕ , de modo que (d) resulta en

$$\frac{\sin^2 \theta}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} + k^2 r^2 \sin^2 \theta = 0. \quad (16)$$

Si analizamos el tercer término de (16) vemos que la ecuación a resolver es de la forma

$$\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = -D \quad (17)$$

donde D es una constante. Esta es una ecuación diferencial ordinaria (EDO) de segundo orden. Las soluciones linealmente independientes son

$$\Phi_e = \cos m\phi, \quad \Phi_o = \sin m\phi,$$

donde los subíndices e y o denotan pares e impares. Requerimos que ψ sea una función de un solo valor del ángulo azimutal ϕ :

$$\lim_{\nu \rightarrow 2\pi} \psi(\phi + \nu) = \psi(\phi)$$

para todos los ϕ . La condición anterior requiere que m sea un número entero o cero; Los valores positivos de m son suficientes para generar todas las soluciones linealmente independientes de (17). La solución general para (17), entonces, es de la forma $\Phi(\phi) = A \sin m\phi + B \cos m\phi$. El primer paso es calcular $\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}$.

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} &= \frac{d}{d\phi} \left[\frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} \right] = \frac{d}{d\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \phi} (A \sin m\phi + B \cos m\phi) \right] \\ &= \frac{d}{d\phi} (Am \cos m\phi - Bm \sin m\phi) = -m^2 A \sin m\phi - m^2 B \cos m\phi \\ &= -m^2 (A \sin m\phi + B \cos m\phi) = -m^2 \Phi(\phi) \end{aligned} \quad (18)$$

Si sustituimos (18) en (17), observamos que

$$\frac{-m^2 \Phi(\phi)}{\Phi(\phi)} = -m^2 = -D,$$

por lo tanto

$$m^2 = D. \quad (19)$$

Ahora sustituimos (19) en (18)

$$\frac{\sin^2 \theta}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) - m^2 + k^2 r^2 \sin^2 \theta = 0. \quad (20)$$

Hacemos un análisis similar ahora con el segundo término de (20) y notamos que el siguiente paso es dividir la ecuación entre $\sin^2 \theta$, lo que nos da

$$\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta \Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + k^2 r^2 = 0. \quad (21)$$

Tomando el segundo término de la expresión (21), la ecuación a resolver es de la forma

$$\frac{1}{\sin \theta \Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = -E. \quad (22)$$

Si realizamos un cambio de variable donde

$$x = \cos \theta; \quad dx = -\sin \theta d\theta,$$

y lo sustituimos en (22), la ecuación adquiere la forma

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d}{dx} \left(\sin^2 \theta \frac{d\Theta(\theta)}{dx} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = -E. \quad (23)$$

Si utilizamos la identidad trigonométrica

$$\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1; \quad \sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta = 1 - x^2,$$

la ecuación (23) resulta

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{d\Theta(\theta)}{dx} \right] - \frac{m^2}{(1 - x^2)} = -E. \quad (24)$$

Si desarrollamos el primer término de (24), tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d\Theta(\theta)}{dx} \right] &= \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d}{dx} \left[\frac{d\Theta(\theta)}{dx} - x^2 \frac{d\Theta(\theta)}{dx} \right] \\
&= \frac{1}{\Theta(\theta)} \left\{ \frac{d^2\Theta(\theta)}{dx^2} - \frac{d}{dx} \left[x^2 \frac{d\Theta(\theta)}{dx} \right] \right\} \\
&= \frac{1}{\Theta(\theta)} \left\{ \frac{d^2\Theta(\theta)}{dx^2} - x^2 \frac{d^2\Theta(\theta)}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta(\theta)}{dx} \right\} \\
&= \frac{1}{\Theta(\theta)} \left\{ (1-x^2) \frac{d^2\Theta(\theta)}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta(\theta)}{dx} \right\}.
\end{aligned}$$

Si ahora sustituimos el resultado anterior en (24) y multiplicamos todo por $\Theta(\theta)$, obtenemos

$$(1-x^2) \frac{d^2\Theta(\theta)}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta(\theta)}{dx} - \frac{m^2}{(1-x^2)} \Theta(\theta) = -E\Theta(\theta).$$

Reagrupando términos semejantes, la ecuación adquiere la forma siguiente

$$(1-x^2) \frac{d^2\Theta(\theta)}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta(\theta)}{dx} + \left[E - \frac{m^2}{(1-x^2)} \right] \Theta(\theta) = 0. \quad (25)$$

Las soluciones a (25) que son finitas en $\theta = 0$ y $\theta = \pi$ requieren que $E = n(n+1)$ y se conocen como las *funciones asociadas de Legendre* del primer tipo $P_n^m(x)$ de grado n y orden m , donde n es un entero al menos igual o mayor que m y de la misma paridad, es decir, $n \geq m$. Estas funciones son ortogonales:

$$\int_{-1}^1 P_n^m(\mu) P_{n'}^m(\mu) d\mu = \delta_{n'n} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!}$$

donde $\mu = \cos \theta$ y $\delta_{n'n}$, la delta de Kronecker es la unidad si $n = n'$ y cero en caso contrario. La forma explícita para las $P_n^m(x)$ es

$$P_n^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x).$$

Cuando $m = 0$, las funciones de Legendre asociadas son los *polinomios de Legendre*, que se denotan con P_n . Dicho lo anterior, tenemos entonces que

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d\Theta(\theta)}{dx} \right] - \frac{m^2}{(1-x^2)} = -n(n+1). \quad (26)$$

Al sustituir (26) en (21) obtenemos

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - n(n+1) + k^2 r^2 = 0. \quad (27)$$

Si introducimos la variable adimensional $\rho = kr$ y definimos la función $Z = R\sqrt{\rho}$, (ρ) se convierte en

$$\frac{\rho^{\frac{1}{2}}}{Z(kr)} \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho^2 \frac{d}{d\rho} \left[Z(kr) \rho^{-\frac{1}{2}} \right] \right\} - n(n+1) + \rho^2 = 0. \quad (28)$$

Como en los casos anteriores, primero debemos desarrollar el primer término de la ecuación anterior

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{\frac{1}{2}}}{Z(kr)} \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho^2 \frac{d}{d\rho} \left[Z(kr) \rho^{-\frac{1}{2}} \right] \right\} &= \frac{\rho^{\frac{1}{2}}}{Z(kr)} \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho^2 \left[\rho^{-\frac{1}{2}} \frac{dZ(kr)}{d\rho} - \frac{1}{2} \rho^{-\frac{3}{2}} Z(kr) \right] \right\} \\ &= \frac{\rho^{\frac{1}{2}}}{Z(kr)} \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho^{\frac{3}{2}} \frac{dZ(kr)}{d\rho} - \frac{1}{2} \rho^{\frac{1}{2}} Z(kr) \right\} \\ &= \frac{\rho^{\frac{1}{2}}}{Z(kr)} \left\{ \rho^{\frac{3}{2}} \frac{d^2 Z(kr)}{d\rho^2} + \frac{3}{2} \rho^{\frac{1}{2}} \frac{dZ(kr)}{d\rho} - \frac{1}{2} \rho^{\frac{1}{2}} \frac{dZ(kr)}{d\rho} - \frac{1}{4} \rho^{-\frac{1}{2}} Z(kr) \right\} \\ &= \frac{1}{Z(kr)} \left\{ \rho^2 \frac{d^2 Z(kr)}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \rho \frac{dZ(kr)}{d\rho} - \frac{1}{4} Z(kr) \right\}. \end{aligned}$$

Sustituyendo el resultado anterior en (28) y multiplicando todo por $Z(kr)$ la ecuación adquiere la forma

$$\rho^2 \frac{d^2 Z(kr)}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \rho \frac{dZ(kr)}{d\rho} - \frac{1}{4} Z(kr) + [\rho^2 - n(n+1)] Z(kr) = 0.$$

Agrupando términos y haciendo un poco de algebra obtenemos

$$\rho^2 \frac{d^2 Z(kr)}{d\rho^2} + \frac{1}{2} \rho \frac{dZ(kr)}{d\rho} + \left[\rho^2 - \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right] Z(kr) = 0. \quad (29)$$

La ecuación (29) es la ecuación de Bessel de orden semi entero $n + 1/2$. Las soluciones linealmente independientes de (29) son las *funciones de Bessel* de primer y segundo tipo J_ν y Y_ν , donde el orden $\nu = n + \frac{1}{2}$ es semientero. Por lo tanto, las soluciones linealmente independientes de (29) son las *funciones de Bessel esféricas*

$$j_\nu(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{n+\frac{1}{2}}(\rho), \quad (30)$$

$$y_\nu(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} Y_{n+\frac{1}{2}}(\rho). \quad (31)$$

donde el factor constante $\sqrt{\frac{\pi}{2}}$ se introduce por conveniencia. Cualquier combinación lineal de j_n y y_n también es una solución para (29). Por lo tanto, podríamos tomar como soluciones fundamentales para (29) dos combinaciones linealmente independientes. Dos de estas combinaciones serán de gran utilidad más adelante por lo que vale la pena mencionarlas, estas son las *funciones esféricas de Bessel del tercer tipo* (a veces llamadas funciones esféricas de Hankel):

$$h_n^{(1)}(\rho) = j_n(\rho) + iy_n(\rho), \quad (32)$$

$$h_n^{(2)}(\rho) = j_n(\rho) - iy_n(\rho). \quad (33)$$

Las funciones esféricas de Bessel satisfacen las relaciones de recurrencia

$$z_{n-1}(\rho) + z_{n+1}(\rho) = \frac{2n+1}{\rho} z_n(\rho), \quad (34)$$

$$(2n+1) \frac{d}{d\rho} z_n(\rho) = nz_{n-1}(\rho) - (n+1)z_{n+1}(\rho), \quad (35)$$

donde z_n es cualquiera de las soluciones Bessel. Los valores asintóticos de j_n , y_n , $h_n^{(1)}$ y $h_n^{(2)}$ pueden obtenerse a partir de las formas asintóticas de las funciones de Bessel correspondientes (Arfken y Mathews, 1972). De aquí encontramos

$$j_n(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{n\pi}{2}\right),$$

$$y_n(\rho) \sim -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{n\pi}{2}\right),$$

$$h_n^{(1)}(\rho) \sim (-i)^{n+1} \frac{e^{i\rho}}{\rho} = -i \frac{e^{i\left(\rho - \frac{n\pi}{2}\right)}}{\rho},$$

$$h_n^{(2)}(\rho) \sim i^{n+1} \frac{e^{-i\rho}}{\rho} = i \frac{e^{-i\left(\rho - \frac{n\pi}{2}\right)}}{\rho}.$$

La condición para estas formas esféricas de Bessel es que $\rho \gg \frac{n(n+1)}{2}$. De estos valores asintóticos vemos que j_n y y_n son apropiados para describir ondas esféricas estacionarias; $h_n^{(1)}$ y $h_n^{(2)}$ corresponden a ondas esféricas que viajan. Si se considera que la dependencia del tiempo para las ondas viajeras es $e^{-i\omega t}$, entonces $h_n^{(1)}$ produce una onda esférica viajera saliente y $h_n^{(2)}$ una onda entrante. La teoría de la radiación en el electromagnetismo y la teoría de la dispersión en la mecánica cuántica proporcionan muchas aplicaciones.

Ahora hemos hecho suficiente trabajo para construir funciones generadoras que satisfagan la ecuación de onda escalar en coordenadas polares esféricas:

$$\psi_{emn} = \cos m\phi P_n^m(\cos\theta) z_n(kr), \quad (36)$$

$$\psi_{omn} = \sin m\phi P_n^m(\cos\theta) z_n(kr), \quad (37)$$

donde $z_n(kr)$ es cualquiera de las cuatro funciones esféricas de Bessel j_n , y_n , $h_n^{(1)}$, $h_n^{(2)}$. Además, debido a que las funciones $\cos m\phi$, $\sin m\phi$, $P_n^m(\cos\theta)$, $z_n(kr)$ forman un conjunto completo ortonormal, cualquier función que satisfaga la ecuación de onda escalar en coordenadas polares esféricas puede expandirse como una serie infinita de las funciones (36) y (37). Los armónicos esféricos vectoriales generados por ψ_{emn} y ψ_{omn} son

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

que, en forma de componentes, puede escribirse

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_{emn} &= \frac{-m}{\sin \theta} \sin m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ &\quad - \cos m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\phi,\end{aligned}\tag{38}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_{omn} &= \frac{m}{\sin \theta} \cos m\phi P_n^m(\cos \theta) z_n(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ &\quad - \sin m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\phi,\end{aligned}\tag{39}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{N}_{emn} &= \frac{z_n(\rho)}{\rho} \cos m\phi n(n+1) P_n^m(\cos \theta) \hat{\mathbf{e}}_r \\ &\quad + \cos m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ &\quad - m \sin m\phi \frac{P_n^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\mathbf{e}}_\phi,\end{aligned}\tag{40}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{N}_{omn} &= \frac{z_n(\rho)}{\rho} \sin m\phi n(n+1) P_n^m(\cos \theta) \hat{\mathbf{e}}_r \\ &\quad + \sin m\phi \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ &\quad + m \cos m\phi \frac{P_n^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\mathbf{e}}_\phi,\end{aligned}\tag{41}$$

donde el componente r de \mathbf{N}_{mn} se ha simplificado utilizando el hecho de que P_n^m satisface (23). Cualquier solución a las ecuaciones de campo ahora se puede expandir en una serie infinita de las funciones (38) - (41).

Anexo B: Expansión de E en armónicos esféricos vectoriales

El problema que nos preocupa es la dispersión de una onda plana polarizada en x, escrita en coordenadas polares esféricas como

$$\mathbf{E}_i = E_0 e^{ikr \cos \theta} \hat{\mathbf{e}}_x, \quad (1)$$

donde

$$\hat{\mathbf{e}}_x = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_r + \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_\theta - \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_\phi, \quad (2)$$

por una esfera arbitraria. El primer paso hacia la solución de este problema es el de expandir la expresión (1) en armónicos esféricos vectoriales (Anexo A):

$$\mathbf{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} (B_{emn} \mathbf{M}_{emn} + B_{omn} \mathbf{M}_{omn} + A_{emn} \mathbf{N}_{emn} + A_{omn} \mathbf{N}_{omn}). \quad (3)$$

El siguiente paso es encontrar las expresiones para los coeficientes de la expansión B_{emn} , B_{omn} , A_{emn} y A_{omn} . Estos coeficientes nos indican qué fracción del campo total está compuesto por el armónico vectorial correspondiente. Por lo tanto, los coeficientes se determinan calculando la magnitud total del armónico vectorial correspondiente a lo largo de todas las direcciones en todo el espacio y dividiendo esa cantidad entre la magnitud total de este igualmente en todo el espacio, por lo que la forma general de los coeficientes es

$$B_{emn} = \frac{(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{M}_{omn}) + (\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{N}_{emn}) + (\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{N}_{omn}) + (\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{E}_i)}{(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{M}_{emn})}, \quad (4)$$

$$B_{omn} = \frac{(\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{M}_{emn}) + (\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{N}_{emn}) + (\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{N}_{omn}) + (\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{E}_i)}{(\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{M}_{omn})}, \quad (5)$$

$$A_{emn} = \frac{(\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{M}_{emn}) + (\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{M}_{omn}) + (\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{N}_{omn}) + (\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{E}_i)}{(\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{N}_{emn})}, \quad (6)$$

$$A_{omn} = \frac{(\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{M}_{emn}) + (\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{M}_{omn}) + (\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{N}_{emn}) + (\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{E}_i)}{(\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{N}_{omn})}, \quad (7)$$

Como $\sin m\phi$ es ortogonal a $\cos m\phi$ para todos m y m' , se deduce que \mathbf{M}_{emn} y \mathbf{M}_{omn} son ortogonales en el sentido de que

$$(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{M}_{omn}) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{em'n'} \cdot \mathbf{M}_{omn} \sin \theta \, d\theta d\phi = 0, \quad (8)$$

para toda m, m', n, n' . Del mismo modo, $(\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{N}_{emn})$, $(\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{N}_{omn})$ y $(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{N}_{emn})$ son conjuntos de funciones mutuamente ortogonales, es decir,

$$(\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{N}_{emn}) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{N}_{om'n'} \cdot \mathbf{N}_{emn} \sin \theta \, d\theta d\phi = 0, \quad (9)$$

$$(\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{N}_{omn}) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{om'n'} \cdot \mathbf{N}_{omn} \sin \theta \, d\theta d\phi = 0, \quad (10)$$

$$(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{N}_{emn}) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{em'n'} \cdot \mathbf{N}_{emn} \sin \theta \, d\theta d\phi = 0. \quad (11)$$

Las propiedades de ortogonalidad de $\cos m\phi$ y $\sin m\phi$ implican que todos los armónicos vectoriales de diferente orden m son mutuamente ortogonales, por lo que debemos considerar únicamente los casos donde $m = m'$ en las expresiones restantes. De los productos escalares $(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{N}_{omn})$ y $(\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{M}_{omn})$, obtenemos la siguiente integral

$$m \int_0^\pi \left(P_n^m \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + P_{n'}^m \frac{dP_n^m}{d\theta} \right) d\theta. \quad (12)$$

De la expresión para la derivada de un producto tenemos

$$\frac{d(uv)}{dx} = u \frac{dv}{dx} + v \frac{du}{dx}. \quad (13)$$

Por lo tanto, de (13) tenemos que

$$P_n^m \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + P_{n'}^m \frac{dP_n^m}{d\theta} = \frac{d(P_n^m P_{n'}^m)}{d\theta}. \quad (14)$$

Sustituyendo (14) en (12) obtenemos

$$m \int_0^\pi \frac{d(P_n^m P_{n'}^m)}{d\theta} d\theta = m P_n^m P_{n'}^m \Big|_0^\pi. \quad (15)$$

La función de Legendre asociada P_n^m está relacionada con la derivada m -ésima del polinomio de Legendre P_n correspondiente,

$$P_n^m(\mu) = (1 - \mu^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_n(\mu)}{d\mu^m}, \quad (16)$$

donde $\mu = \cos \theta$, de lo que se deduce que P_n^m desaparece para $\theta = 0$ y $\theta = \pi$ excepto cuando $m = 0$. Por lo tanto, (15) desaparece para todos m , n y n' , lo que, a su vez, indica que

$$(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{N}_{omn}) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{emn'} \cdot \mathbf{N}_{omn} \sin \theta d\theta d\phi = 0, \quad (17)$$

$$(\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{M}_{omn}) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{N}_{emn'} \cdot \mathbf{M}_{omn} \sin \theta d\theta d\phi = 0, \quad (18)$$

En los productos de $(\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{M}_{emn})$, $(\mathbf{M}_{omn}, \mathbf{M}_{omn})$, $(\mathbf{N}_{emn}, \mathbf{N}_{emn})$ y $(\mathbf{N}_{omn}, \mathbf{N}_{omn})$ cuando $n \neq n'$ y $m \neq 0$, nos topamos con una integral de la forma

$$\int_0^\pi \left(\frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + m^2 \frac{P_n^m P_{n'}^m}{\sin^2 \theta} \right) \sin \theta d\theta. \quad (19)$$

Debido que tanto P_n^m como $P_{n'}^m$ satisfacen la relación

$$\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta \sin \theta = 0, \quad (20)$$

podemos escribir $\Theta = P_n^m P_{n'}^m$, donde tenemos

$$\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_n^m P_{n'}^m \sin \theta = 0, \quad (21)$$

Desarrollando el primer término de (21) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right) &= \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta P_n^m \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + \sin \theta P_{n'}^m \frac{dP_n^m}{d\theta} \right] \\ &= \sin \theta \left(P_n^m \frac{d^2 P_{n'}^m}{d\theta^2} + \frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} \right) + \cos \theta P_n^m \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} \\ &\quad + \sin \theta \left(P_{n'}^m \frac{d^2 P_n^m}{d\theta^2} + \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} \frac{dP_n^m}{d\theta} \right) + \cos \theta P_{n'}^m \frac{dP_n^m}{d\theta}. \end{aligned}$$

Reagrupando términos tenemos

$$\begin{aligned} 2 \sin \theta \frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + P_n^m \left(\sin \theta \frac{d^2 P_{n'}^m}{d\theta^2} + \cos \theta \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} \right) + P_{n'}^m \left(\sin \theta \frac{d^2 P_n^m}{d\theta^2} + \cos \theta \frac{dP_n^m}{d\theta} \right) \\ = 2 \sin \theta \frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + P_n^m \left[\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} \right) \right] + P_{n'}^m \left[\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m}{d\theta} \right) \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

De la relación (20) observamos que

$$P_n^m \left[\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} \right) \right] = - \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_n^m P_{n'}^m \sin \theta, \quad (23)$$

$$P_{n'}^m \left[\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m}{d\theta} \right) \right] = - \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_{n'}^m P_n^m \sin \theta. \quad (24)$$

Sustituyendo (23) y (24) en (22) tenemos

$$\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right) = 2 \sin \theta \frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} - 2 \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_n^m P_{n'}^m \sin \theta. \quad (25)$$

Introduciendo (25) en (21) y agrupando términos nos resulta que

$$2 \sin \theta \frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} = \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_n^m P_{n'}^m \sin \theta = -\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right). \quad (26)$$

Además, de (21) podemos obtener

$$2 \sin \theta \frac{m^2}{\sin^2 \theta} P_n^m P_{n'}^m = 2 \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right) + 2n(n+1) P_n^m P_{n'}^m \sin \theta. \quad (27)$$

Por lo tanto, usando (26) y (27) encontramos que

$$2 \sin \theta \left(\frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + m^2 \frac{P_n^m P_{n'}^m}{\sin^2 \theta} \right) = 2n(n+1) P_n^m P_{n'}^m \sin \theta + \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right). \quad (28)$$

Sustituyendo (28) en (19) tenemos

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi \left[2n(n+1) P_n^m P_{n'}^m \sin \theta + \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right) \right] d\theta, \quad (29)$$

que se puede separar en las dos integrales siguientes

$$n(n+1) \int_0^\pi P_n^m P_{n'}^m \sin \theta d\theta, \quad (30)$$

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right) d\theta. \quad (31)$$

De las relaciones de ortogonalidad para las P_n^m (Anexo A),

$$\int_{-1}^1 P_n^m(\mu) P_{n'}^m(\mu) d\mu = \delta_{n'n} \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (32)$$

donde $\mu = \cos \theta$ y $\delta_{n'n}$, la delta de Kronecker es la unidad si $n = n'$ y cero en caso contrario. Por lo tanto,

$$-n(n+1) \int_0^\pi P_n^m P_{n'}^m \sin \theta d\theta = 0, \quad (33)$$

para $n \neq n'$. La integral (31) resulta

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \right) d\theta = \sin \theta \frac{dP_n^m P_{n'}^m}{d\theta} \Big|_0^\pi = 0. \quad (34)$$

Por lo tanto,

$$\int_0^\pi \left(\frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + m^2 \frac{P_n^m P_{n'}^m}{\sin^2 \theta} \right) \sin \theta d\theta = 0. \quad (35)$$

La expresión (35) demuestra las relaciones de ortogonalidad restantes

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{emn} \cdot \mathbf{M}_{emn'} \sin \theta d\theta d\phi = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{omn} \cdot \mathbf{M}_{omn'} \sin \theta d\theta d\phi = 0,$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{N}_{emn} \cdot \mathbf{N}_{emn'} \sin \theta d\theta d\phi = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{N}_{omn} \cdot \mathbf{N}_{omn'} \sin \theta d\theta d\phi = 0,$$

cuando $n \neq n'$ y $m \neq 0$. Cuando $m = 0$, \mathbf{N}_{omn} y \mathbf{M}_{omn} desaparecen; la ortogonalidad de \mathbf{M}_{emn} y \mathbf{N}_{emn} cuando $m = 0$ también se deduce de (35).

La ortogonalidad de todos los armónicos esféricos vectoriales, que se estableció anteriormente, implica que los coeficientes en la expansión (3) son de la forma

$$B_{emn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{M}_{emn} \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\mathbf{M}_{emn}|^2 \sin \theta d\theta d\phi}, \quad (36)$$

$$B_{omn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{M}_{omn} \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\mathbf{M}_{omn}|^2 \sin \theta d\theta d\phi}, \quad (37)$$

$$A_{emn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{N}_{emn} \sin \theta \, d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\mathbf{N}_{emn}|^2 \sin \theta \, d\theta d\phi}, \quad (38)$$

$$A_{omn} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{N}_{omn} \sin \theta \, d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\mathbf{N}_{omn}|^2 \sin \theta \, d\theta d\phi}. \quad (39)$$

De (2) y las expresiones correspondientes para \mathbf{M}_{emn} y \mathbf{N}_{omn} junto con las relaciones de ortogonalidad entre senos y cosenos podemos ver fácilmente que

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{M}_{emn} \sin \theta \, d\theta d\phi = 0,$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{N}_{omn} \sin \theta \, d\theta d\phi = 0.$$

Por lo tanto, $B_{emn} = A_{omn} = 0$ para todos m y n . Además, los coeficientes B_{omn} , A_{emn} restantes desaparecen a menos que $m = 1$ por la misma razón. El campo incidente es finito en el origen, lo que requiere que $j_n(kr)$ sea la función de Bessel esférica apropiada en las funciones generadoras ψ_{o1n} y ψ_{e1n} (Anexo A); se rechaza y_n por su mal comportamiento en el origen. Se anexa el superíndice (1) a los armónicos esféricos vectoriales para los cuales la dependencia radial de las funciones generadoras este especificada por j_n . Por lo tanto, la expansión para \mathbf{E}_i tiene la forma

$$\mathbf{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty} \left(B_{o1n} \mathbf{M}_{o1n}^{(1)} + A_{e1n} \mathbf{N}_{e1n}^{(1)} \right). \quad (40)$$

La integral en el denominador de B_{o1n} es

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\mathbf{M}_{o1n}|^2 \sin \theta \, d\theta d\phi \\
&= j_n j_n^* \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \frac{dP_n^1}{d\theta} \frac{dP_n^{1*}}{d\theta} \sin \theta \, d\theta \\
&+ j_n j_n^* \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \left(\frac{P_n^1 P_n^{1*}}{\sin^2 \theta} - \frac{dP_n^1}{d\theta} \frac{dP_n^{1*}}{d\theta} \right) \sin \theta \, d\theta.
\end{aligned} \tag{41}$$

El resultado de las integrales de la parte azimutal es el siguiente

$$\int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi = \frac{\phi}{2} + \frac{1}{4} \sin 2\phi \Big|_0^{2\pi} = \pi, \tag{42}$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi = \phi \Big|_0^{2\pi} = 2\pi. \tag{43}$$

De la relación (26) y (34) tenemos que

$$\int_0^\pi \frac{dP_n^1}{d\theta} \frac{dP_n^{1*}}{d\theta} \sin \theta \, d\theta = \int_0^\pi \left[\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^1 P_n^{1*}}{d\theta} \right) \right] \sin \theta \, d\theta = 0. \tag{44}$$

De (26) y (27) obtenemos que

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \int_0^\pi 2 \left(\frac{P_n^1 P_n^{1*}}{\sin^2 \theta} - \frac{dP_n^1}{d\theta} \frac{dP_n^{1*}}{d\theta} \right) \sin \theta \, d\theta \\
&= \frac{3}{2} \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^1 P_n^{1*}}{d\theta} \right) \sin \theta \, d\theta + n(n+1) \int_0^\pi P_n^1 P_n^{1*} \sin \theta \, d\theta.
\end{aligned} \tag{45}$$

De (32) y (44) podemos determinar fácilmente que

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi 2 \left(\frac{P_n^1 P_n^{1*}}{\sin^2 \theta} - \frac{dP_n^1}{d\theta} \frac{dP_n^{1*}}{d\theta} \right) \sin \theta \, d\theta = \frac{2n^2(n+1)^2}{2n+1}. \tag{46}$$

Por lo tanto (41) resulta

$$j_n j_n^* \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\mathbf{M}_{o1n}|^2 \sin \theta \, d\theta d\phi = \pi j_n j_n^* \frac{2n^2(n+1)^2}{2n+1}. \quad (47)$$

La integral en el numerador de B_{o1n} es

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{M}_{o1n} \sin \theta \, d\theta d\phi \\ &= E_0 j_n \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(\cos^2 \phi \cos \theta P_n^1 + \sin^2 \phi \sin \theta \frac{dP_n^1}{d\theta} \right) e^{ikr \cos \theta} \, d\theta d\phi, \end{aligned} \quad (48)$$

usando definición (13) junto con la identidad trigonométrica

$$\cos^2 \phi + \sin^2 \phi = 1 \quad (49)$$

podemos escribir (48) de la forma

$$E_0 j_n \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left\{ \cos^2 \phi \cos \theta P_n^1 + (1 - \cos^2 \phi) \left[\frac{d}{d\theta} (\sin \theta P_n^1) - \cos \theta P_n^1 \right] \right\} e^{ikr \cos \theta} \, d\theta d\phi, \quad (50)$$

Desarrollando la expresión (50) y agrupando términos semejantes tenemos

$$\begin{aligned} & E_0 j_n \left\{ \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \left[\int_0^\pi 2 \cos \theta P_n^1 e^{ikr \cos \theta} \, d\theta - \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} (\sin \theta P_n^1) e^{ikr \cos \theta} \, d\theta \right] \right. \\ & \quad \left. + \int_0^{2\pi} d\phi \left[\int_0^\pi \frac{d}{d\theta} (\sin \theta P_n^1) e^{ikr \cos \theta} \, d\theta - \int_0^\pi \cos \theta P_n^1 e^{ikr \cos \theta} \, d\theta \right] \right\}. \end{aligned} \quad (51)$$

Sustituyendo las expresiones (42) y (43) en (51) la expresión resulta

$$E_0 j_n \pi \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} (\sin \theta P_n^1) e^{ikr \cos \theta} \, d\theta. \quad (52)$$

De (32) tenemos

$$P_n^1 = -\frac{dP_n}{d\theta}, \quad (53)$$

donde los polinomios de Legendre de grado n satisfacen (20):

$$\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) = -n(n+1)P_n \sin \theta. \quad (54)$$

Por lo tanto, (52) es

$$E_0 j_n \pi n(n+1) \int_0^\pi P_n \sin \theta e^{ikr \cos \theta} d\theta. \quad (55)$$

De la generalización de Gegenbauer de la integral de Poisson (Watson, 1995):

$$j_n(\rho) = \frac{i^{-n}}{2} \int_0^\pi e^{i\rho \cos \theta} P_n \sin \theta d\theta, \quad (56)$$

tenemos que la integral (55) resulta

$$E_0 j_n \pi n(n+1) \frac{2}{i^{-n} j_n} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{M}_{o1n} \sin \theta d\theta d\phi. \quad (57)$$

Finalmente, de los resultados (47) y (57) determinamos que los coeficientes de expansión B_{o1n} son de la forma

$$B_{o1n} = i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)}. \quad (58)$$

Para encontrar los coeficientes de expansión A_{e1n} seguimos un procedimiento similar. La integral en el denominador es

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\mathbf{N}_{e1n}|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \\
&= \frac{j_n j_n^*}{\rho \rho^*} n^2 (n+1)^2 \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi P_n^1 P_n^{1*} \sin \theta \, d\theta \\
&+ \frac{1}{\rho \rho^*} \frac{d}{d\theta} (\rho j_n) \frac{d}{d\theta} (\rho^* j_n^*) \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \frac{dP_n^1}{d\theta} \frac{dP_n^{1*}}{d\theta} \sin \theta \, d\theta \\
&+ \frac{1}{\rho \rho^*} \frac{d}{d\theta} (\rho j_n) \frac{d}{d\theta} (\rho^* j_n^*) \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \frac{P_n^1 P_n^{1*}}{\sin^2 \theta} \sin \theta \, d\theta.
\end{aligned} \tag{59}$$

Utilizando (32) y (42) podemos ver fácilmente que la primera integral de (59) es

$$\frac{j_n j_n^*}{\rho \rho^*} n^2 (n+1)^2 \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi P_n^1 P_n^{1*} \sin \theta \, d\theta = \frac{j_n j_n^*}{\rho \rho^*} n^2 (n+1)^2 \pi \frac{2n(n+1)}{2n+1}. \tag{60}$$

De (44) vemos que la segunda integral de (59) es

$$\frac{1}{\rho \rho^*} \frac{d}{d\theta} (\rho j_n) \frac{d}{d\theta} (\rho^* j_n^*) \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \frac{dP_n^1}{d\theta} \frac{dP_n^{1*}}{d\theta} \sin \theta \, d\theta = 0. \tag{61}$$

Finalmente, utilizando la relación (21) podemos escribir la tercera integral de (59) de la forma

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \frac{P_n^1 P_n^{1*}}{\sin^2 \theta} \sin \theta \, d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \left(\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^1 P_n^{1*}}{d\theta} \right) + n(n+1) P_n^1 P_n^{1*} \sin \theta \right) d\theta.
\end{aligned} \tag{62}$$

Donde, usando los resultados de (60) y (61) junto con

$$\int_0^{2\pi} \sin^2 \phi \, d\phi = \frac{\phi}{2} - \frac{1}{4} \sin 2\phi \Big|_0^{2\pi} = \pi, \tag{63}$$

se aprecia que el resultado para (62) es

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \left[\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^1 P_n^{1*}}{d\theta} \right) + n(n+1) P_n^1 P_n^{1*} \sin \theta \right] d\theta \\
& = \pi n(n+1) \frac{2n(n+1)}{2n+1}.
\end{aligned} \tag{64}$$

Por lo tanto, usando (60), (61) y (64) obtenemos que

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |N_{e1n}|^2 \sin \theta \, d\theta d\phi \\
& = \pi n(n+1) \frac{2n(n+1)}{2n+1} \left[n(n+1) \frac{j_n j_n^*}{\rho \rho^*} + \frac{1}{\rho \rho^*} \frac{d}{d\theta} (\rho j_n) \frac{d}{d\theta} (\rho^* j_n^*) \right].
\end{aligned} \tag{65}$$

La integral en el numerador de A_{e1n} es

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{N}_{e1n} \sin \theta \, d\theta d\phi \\
& = E_0 \left\{ n(n+1) \frac{j_n}{\rho} \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \sin \theta P_n^1 e^{ikr \cos \theta} \sin \theta \, d\theta \right. \\
& + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} (\rho j_n) \left[\int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \cos \theta \frac{dP_n^1}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta \, d\theta \right. \\
& \left. \left. + \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi \, d\phi \int_0^\pi \frac{P_n^1}{\sin \theta} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta \, d\theta \right] \right\},
\end{aligned} \tag{66}$$

Usando (42) y (63) podemos simplificar (66) y obtenemos

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{N}_{e1n} \sin \theta \, d\theta d\phi \\
& = E_0 \left\{ n(n+1) \pi \frac{j_n}{\rho} \int_0^\pi \sin \theta P_n^1 e^{ikr \cos \theta} \sin \theta \, d\theta \right. \\
& \left. + \frac{\pi}{\rho} \frac{d}{d\rho} (\rho j_n) \int_0^\pi \left(\cos \theta \frac{dP_n^1}{d\theta} + \frac{P_n^1}{\sin \theta} \right) e^{ikr \cos \theta} \sin \theta \, d\theta \right\}.
\end{aligned} \tag{67}$$

Nos enfocamos en la primera integral de (67)

$$\int_0^{\pi} \sin \theta P_n^1 e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \quad (68)$$

Integrando por partes podemos ver que si

$$U = \sin \theta P_n^1; \quad dU = \frac{d}{d\theta}(\sin \theta P_n^1) d\theta, \quad (69)$$

$$V = \frac{e^{ikr \cos \theta}}{-ikr}; \quad dV = e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta, \quad (70)$$

La expresión (68) según

$$\int U dV = UV - \int V dU, \quad (71)$$

es igual a

$$\int_0^{\pi} \sin \theta P_n^1 e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta = \frac{\sin \theta P_n^1 e^{ikr \cos \theta}}{-ikr} \Big|_0^{\pi} + \frac{1}{ikr} \int_0^{\pi} e^{ikr \cos \theta} \frac{d}{d\theta}(\sin \theta P_n^1) d\theta. \quad (72)$$

Del desarrollo (52) – (57) podemos determinar que (72) es

$$\int_0^{\pi} \sin \theta P_n^1 e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta = \frac{2n(n+1)j_n i^n}{ikr}. \quad (73)$$

La siguiente integral por resolver es

$$\int_0^{\pi} \left(\cos \theta \frac{dP_n^1}{d\theta} + \frac{P_n^1}{\sin \theta} \right) e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \quad (74)$$

Usando la expresión (20) podemos escribir (74) de la siguiente forma

$$\int_0^{\pi} \left[\cos \theta \frac{dP_n^1}{d\theta} + \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n^1}{d\theta} \right) + n(n+1)P_n^1 \sin \theta \right] e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \quad (75)$$

De la relación (53), (75) resulta

$$= \int_0^\pi \left[-\cos \theta \frac{d^2 P_n}{d\theta^2} - \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d^2 P_n}{d\theta^2} \right) - n(n+1) \frac{dP_n}{d\theta} \sin \theta \right] e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \quad (76)$$

Usando (13) podemos escribir

$$\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) = \sin \theta \frac{d^2 P_n}{d\theta^2} + \cos \theta \frac{dP_n}{d\theta}. \quad (77)$$

Si sustituimos (77) en (76), esta resulta

$$\begin{aligned} &= \int_0^\pi \left\{ -\cos \theta \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) - \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{dP_n}{d\theta} \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{d}{d\theta} \left\{ \sin \theta \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) - \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{dP_n}{d\theta} \right] \right\} \right. \\ &\quad \left. - n(n+1) \frac{dP_n}{d\theta} \sin \theta \right\} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (78)$$

Desarrollando (78) obtenemos

$$\begin{aligned} &= \int_0^\pi \left\{ -\frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) + \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} \frac{dP_n}{d\theta} - \frac{d}{d\theta} \left\{ \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) - \cos \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right\} \right. \\ &\quad \left. - n(n+1) \frac{dP_n}{d\theta} \sin \theta \right\} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (79)$$

Sustituyendo la expresión (54) en (79) nos da

$$\begin{aligned} &= \int_0^\pi \left\{ n(n+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_n \sin \theta + \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} \frac{dP_n}{d\theta} + n(n+1) \frac{d}{d\theta} (P_n \sin \theta) + \frac{d}{d\theta} \left(\cos \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) \right. \\ &\quad \left. - n(n+1) \frac{dP_n}{d\theta} \sin \theta \right\} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (80)$$

Las integrales por resolver son las siguientes

$$n(n+1) \int_0^\pi \cos \theta P_n \sin \theta e^{ikr \cos \theta} d\theta, \quad (81)$$

$$\int_0^\pi \cos^2 \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} d\theta, \quad (82)$$

$$n(n+1) \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} (P_n \sin \theta) e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta, \quad (83)$$

$$\int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left(\cos \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta, \quad (84)$$

$$-n(n+1) \int_0^\pi \frac{dP_n}{d\theta} \sin \theta e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \quad (85)$$

Utilizando (49), la integral (82) se vuelve

$$\int_0^\pi \cos^2 \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} d\theta = \int_0^\pi \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} d\theta - \int_0^\pi \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \quad (86)$$

Si aplicamos (13) en la integral (83) encontramos que

$$\begin{aligned} n(n+1) \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} (P_n \sin \theta) e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta \\ = n(n+1) \int_0^\pi P_n \cos \theta e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta \\ + n(n+1) \int_0^\pi \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (87)$$

Si aplicamos (13) a la integral (84) vemos que

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left(\cos \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta \\ = \int_0^\pi \cos \theta \frac{d^2 P_n}{d\theta^2} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta - \int_0^\pi \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta, \end{aligned} \quad (88)$$

Sustituyendo (77) en (88) obtenemos

$$\begin{aligned}
& \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left(\cos \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) e^{ikr \cos \theta} d\theta \\
&= \int_0^\pi \cos \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) e^{ikr \cos \theta} d\theta - \int_0^\pi \cos^2 \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} d\theta \\
&\quad - \int_0^\pi \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta.
\end{aligned} \tag{89}$$

Utilizando (49) y (54) en (89) obtenemos que

$$\begin{aligned}
& \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left(\cos \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) e^{ikr \cos \theta} d\theta \\
&= -n(n+1) \int_0^\pi \cos \theta P_n \sin \theta e^{ikr \cos \theta} d\theta - \int_0^\pi \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} d\theta.
\end{aligned} \tag{90}$$

Sustituyendo (86), (87) y (90) en (80) obtenemos que

$$\begin{aligned}
& \int_0^\pi \left(\cos \theta \frac{dP_n^1}{d\theta} + \frac{P_n^1}{\sin \theta} \right) e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta \\
&= n(n+1) \int_0^\pi \cos \theta P_n \sin \theta e^{ikr \cos \theta} d\theta - \int_0^\pi \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta.
\end{aligned} \tag{91}$$

Si multiplicamos la expresión (56) por ρ y después derivamos la expresión resultante con respecto de ρ obtenemos

$$\frac{2i^n}{i\rho} \left[\frac{d}{d\rho} (\rho j_n) - j_n \right] = \int_0^\pi \cos \theta P_n e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta. \tag{92}$$

Por lo tanto, de (92) podemos apreciar que la primera integral de (91) resulta

$$n(n+1) \int_0^\pi \cos \theta P_n \sin \theta e^{ikr \cos \theta} d\theta = \frac{2i^n n(n+1)}{i\rho} \left[\frac{d}{d\rho} (\rho j_n) - j_n \right]. \tag{93}$$

Integrando por partes la segunda integral de (91), donde

$$U = \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta}; \quad dU = \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) d\theta,$$

$$V = -\frac{1}{ikr} e^{ikr \cos \theta}; \quad dV = e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta,$$

tenemos que

$$\begin{aligned} & \int_0^\pi \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{i\rho \cos \theta} \sin \theta d\theta \\ &= -\frac{1}{i\rho} \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{i\rho \cos \theta} \Big|_0^\pi + \frac{1}{i\rho} \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) e^{i\rho \cos \theta} d\theta. \end{aligned} \quad (94)$$

Usando el desarrollo de (52) – (57) en (94) obtenemos

$$\int_0^\pi \sin \theta \frac{dP_n}{d\theta} e^{i\rho \cos \theta} \sin \theta d\theta = \frac{2n(n+1)i^n}{i\rho} j_n. \quad (95)$$

Finalmente, de (93) y (95) podemos ver que

$$\int_0^\pi \left(\cos \theta \frac{dP_n^1}{d\theta} + \frac{P_n^1}{\sin \theta} \right) e^{i\rho \cos \theta} \sin \theta d\theta = \frac{2i^n n(n+1)}{i\rho} \frac{d}{d\rho} (\rho j_n). \quad (96)$$

Por lo tanto, usando (73) y (96), encontramos que (67) es igual a

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{N}_{e1n} \sin \theta d\theta d\phi = E_0 \frac{2\pi n(n+1)i^n}{i} \left\{ n(n+1) \frac{j_n^2}{\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \left[\frac{d}{d\rho} (\rho j_n) \right]^2 \right\}. \quad (97)$$

Usando los resultados obtenidos en (65) y (97) podemos determinar que, según (38), los coeficientes de expansión son

$$A_{e1n} = -iE_0 i^n \frac{2n+1}{n(n+1)}. \quad (98)$$

La expansión deseada de una onda plana en armónicos esféricos es, según (58) y (98),

$$\mathbf{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i \mathbf{N}_{e1n}^{(1)} \right) \quad (99)$$

Anexo C: Eficiencias de extinción, absorción y dispersión de una partícula esférica

A continuación, se muestran los resultados obtenidos para las Eficiencias de extinción, dispersión y absorción de una partícula esférica para distintos radios y composición iluminadas por una onda plana polarizada en x . Todos los resultados siguientes se obtuvieron utilizando la teoría de Mie y un modelo en COMSOL Multiphysics.

Caso 1: Partícula esférica de oro con radio de 10 nm:

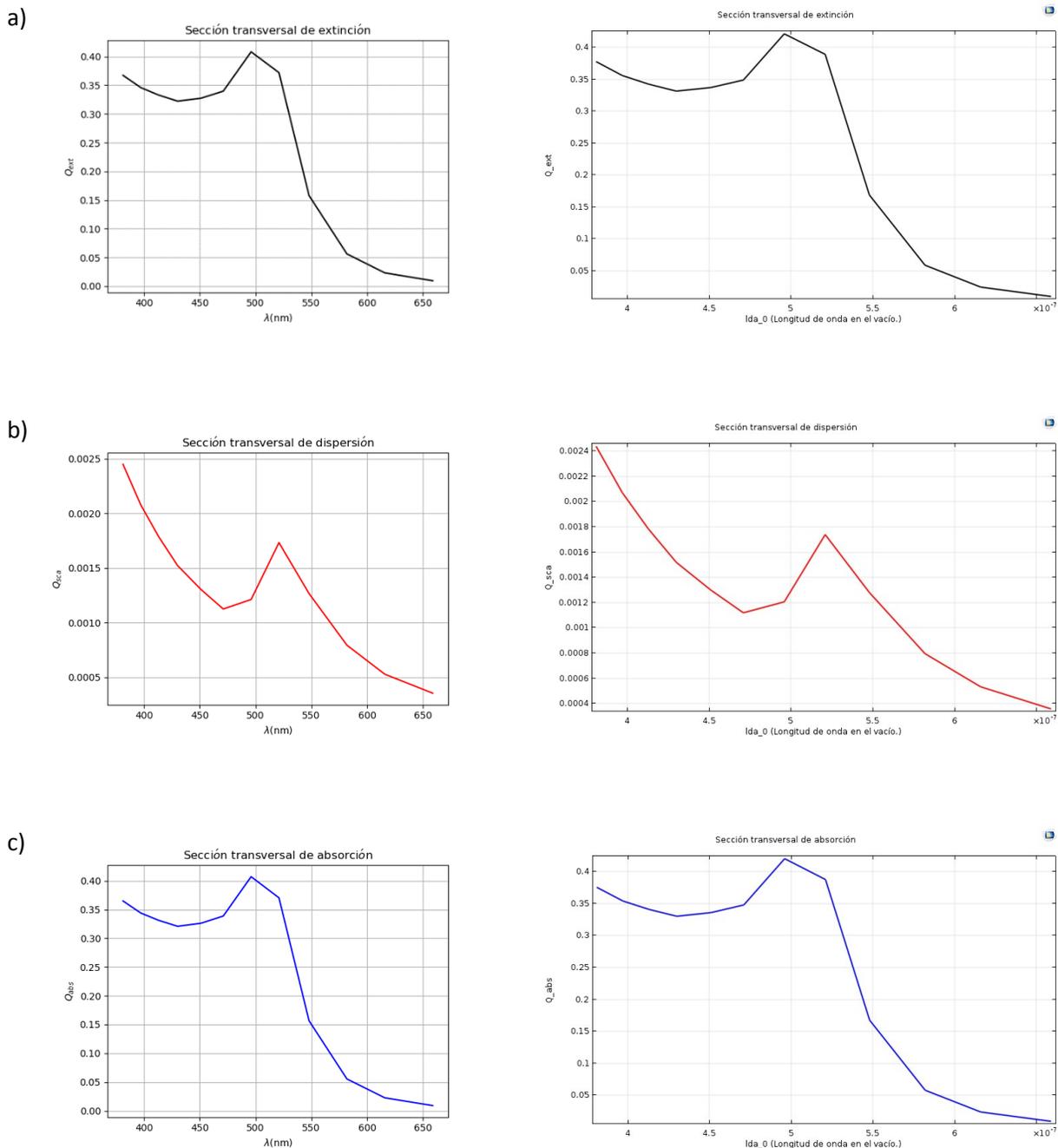


Figura 40. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 10 nm de radio en aire.

Caso 2: Partícula esférica de oro con radio de 25 nm:

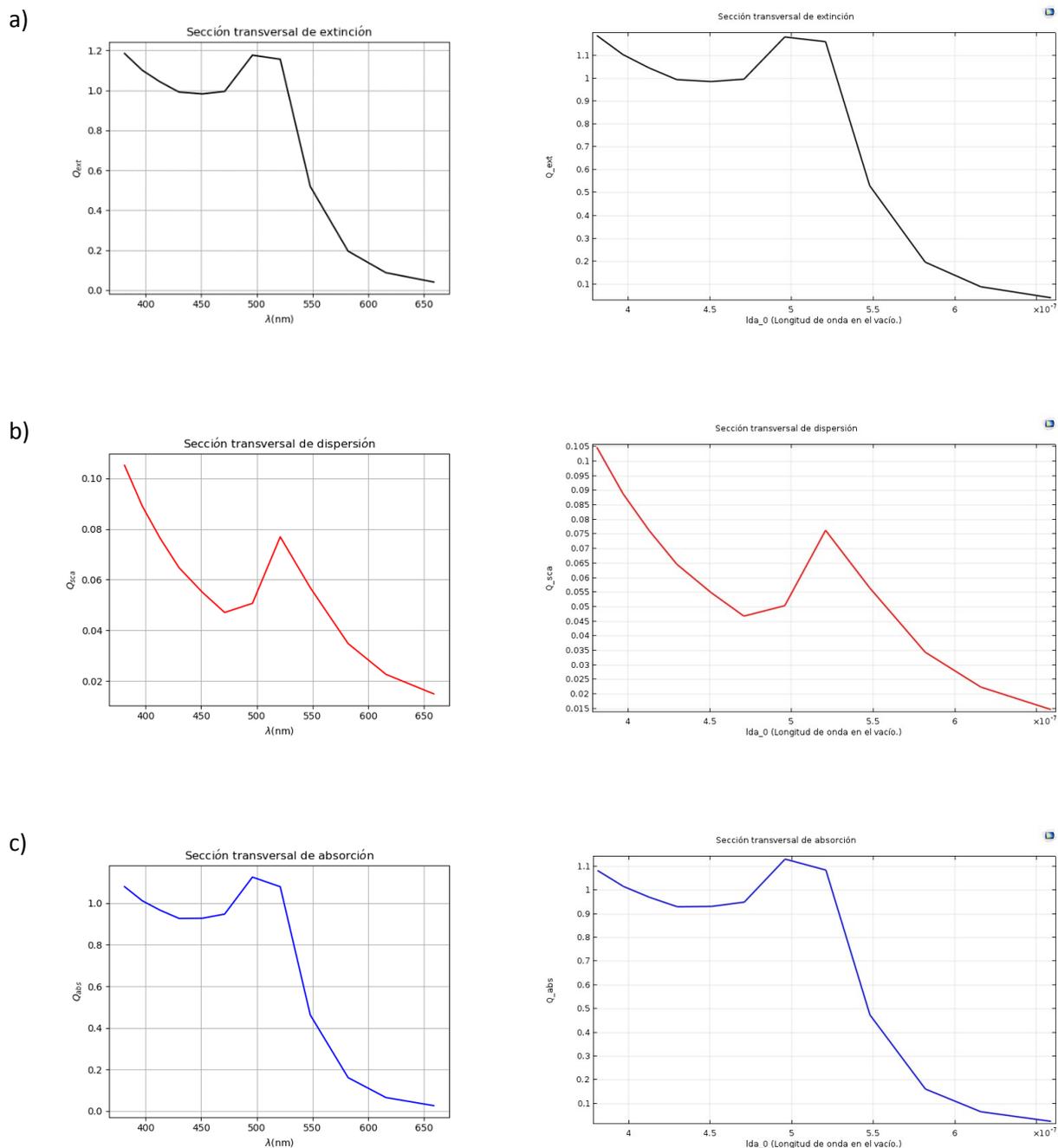


Figura 41. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 25nm de radio en aire.

Caso 3: Partícula esférica de oro con radio de 50 nm:

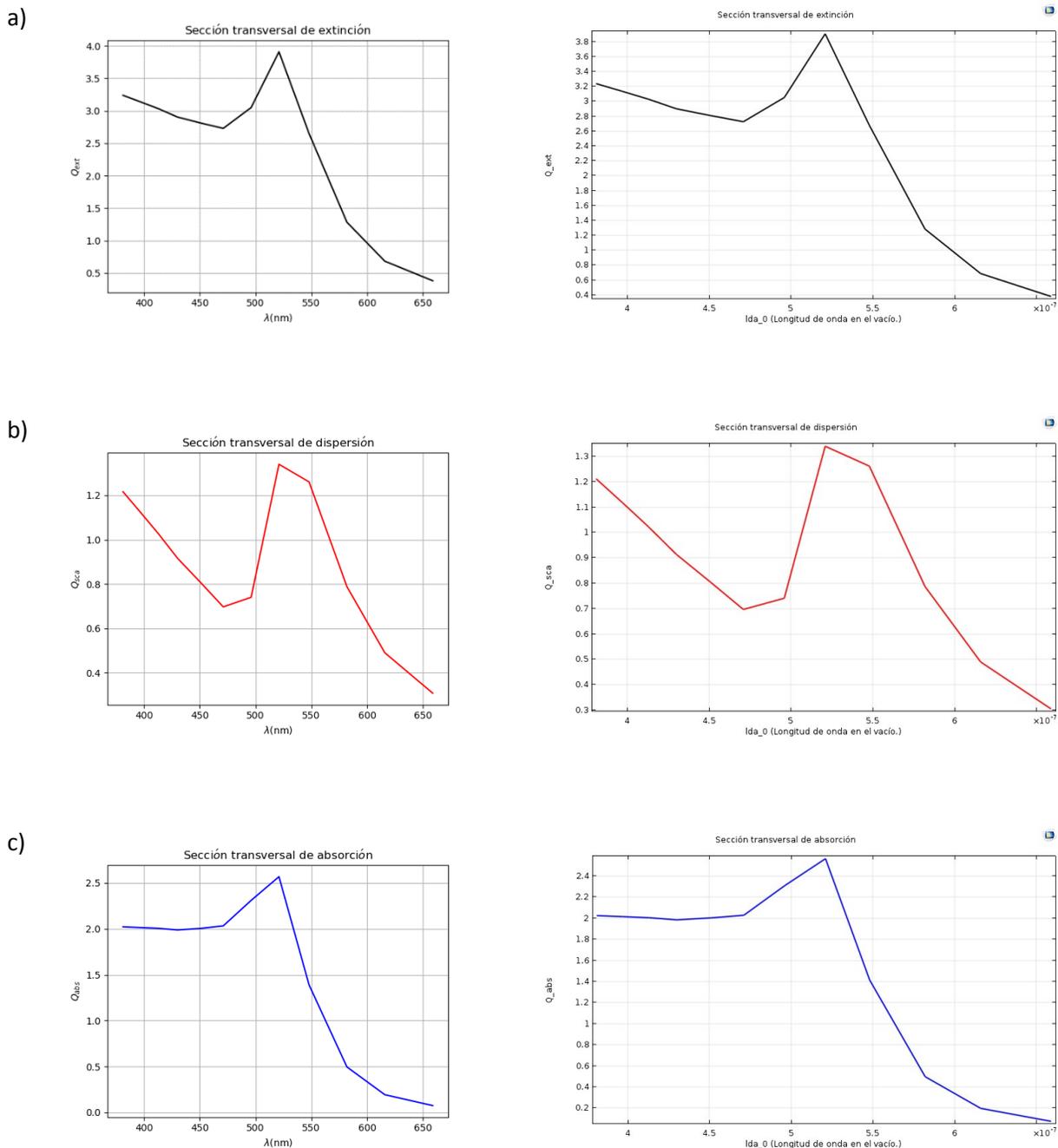


Figura 42. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 50nm de radio en aire.

Caso 4: Partícula esférica de oro con radio de 100 nm:

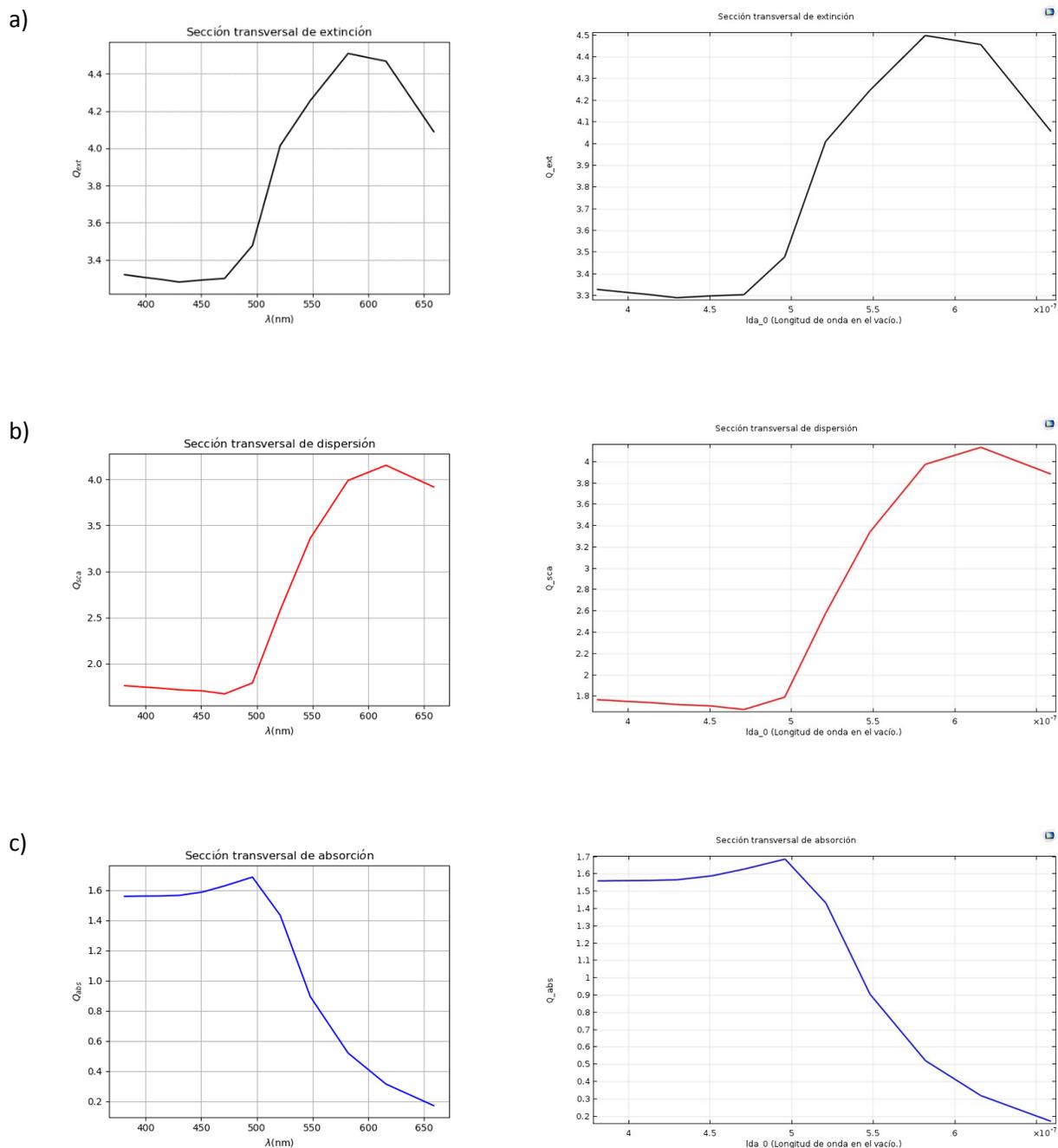


Figura 43. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 100nm de radio en aire.

Caso 5: Partícula esférica de oro con radio de 250 nm:

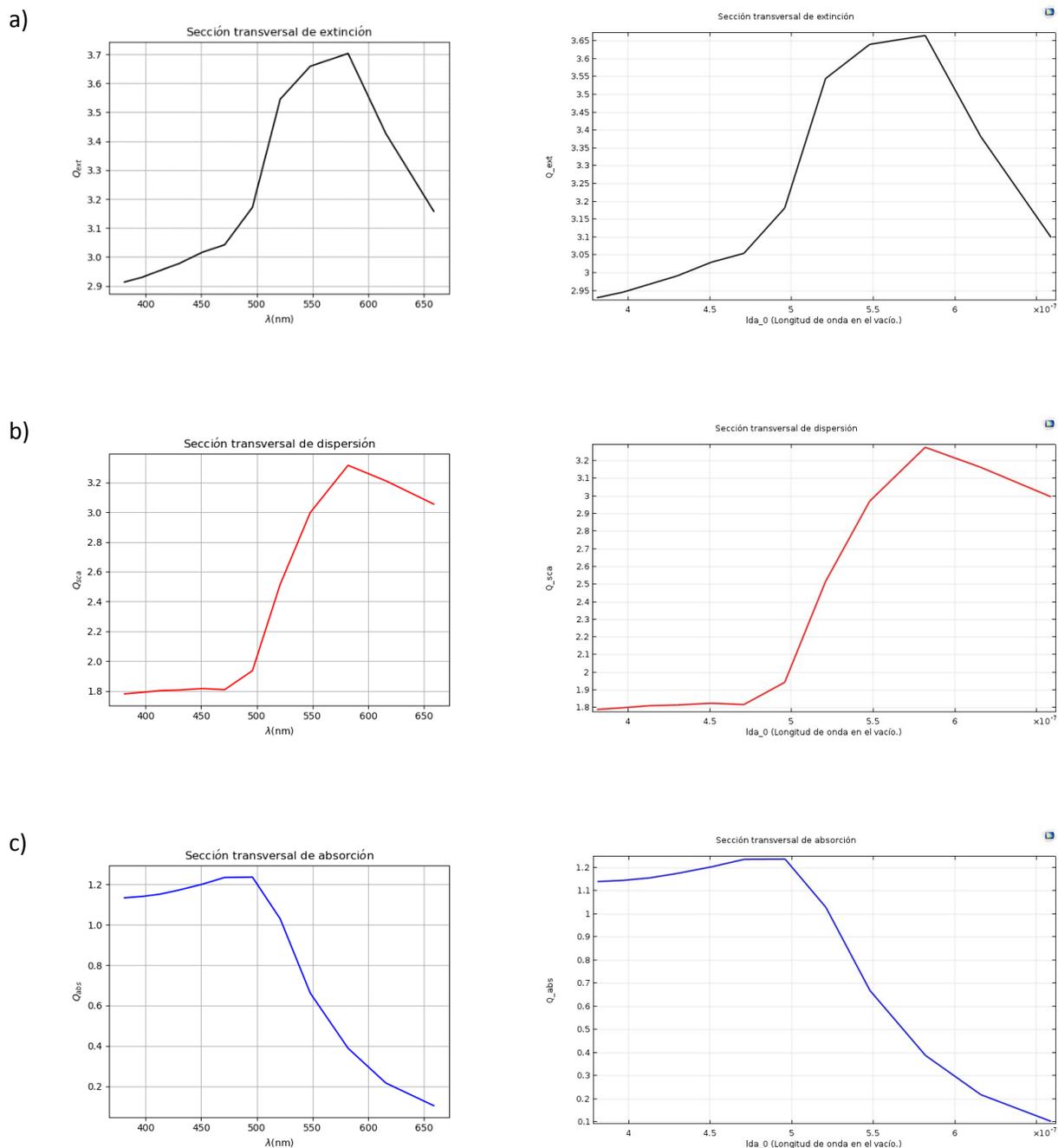


Figura 44. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de oro con forma esférica de 250nm de radio en aire.

Caso 6: Partícula esférica de plata con radio de 10 nm:

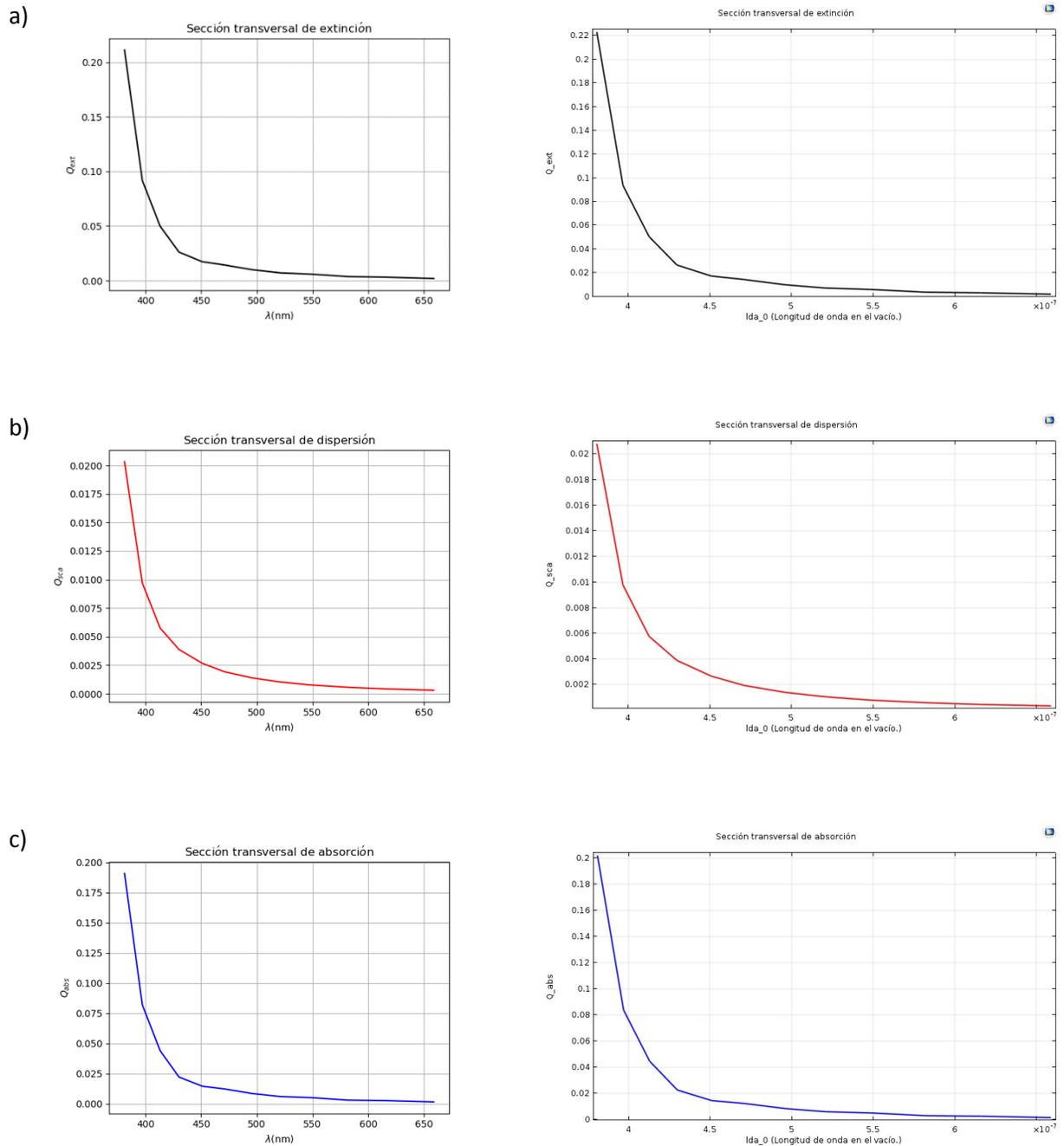


Figura 45. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 10nm de radio en aire.

Caso 7: Partícula esférica de plata con radio de 25 nm:

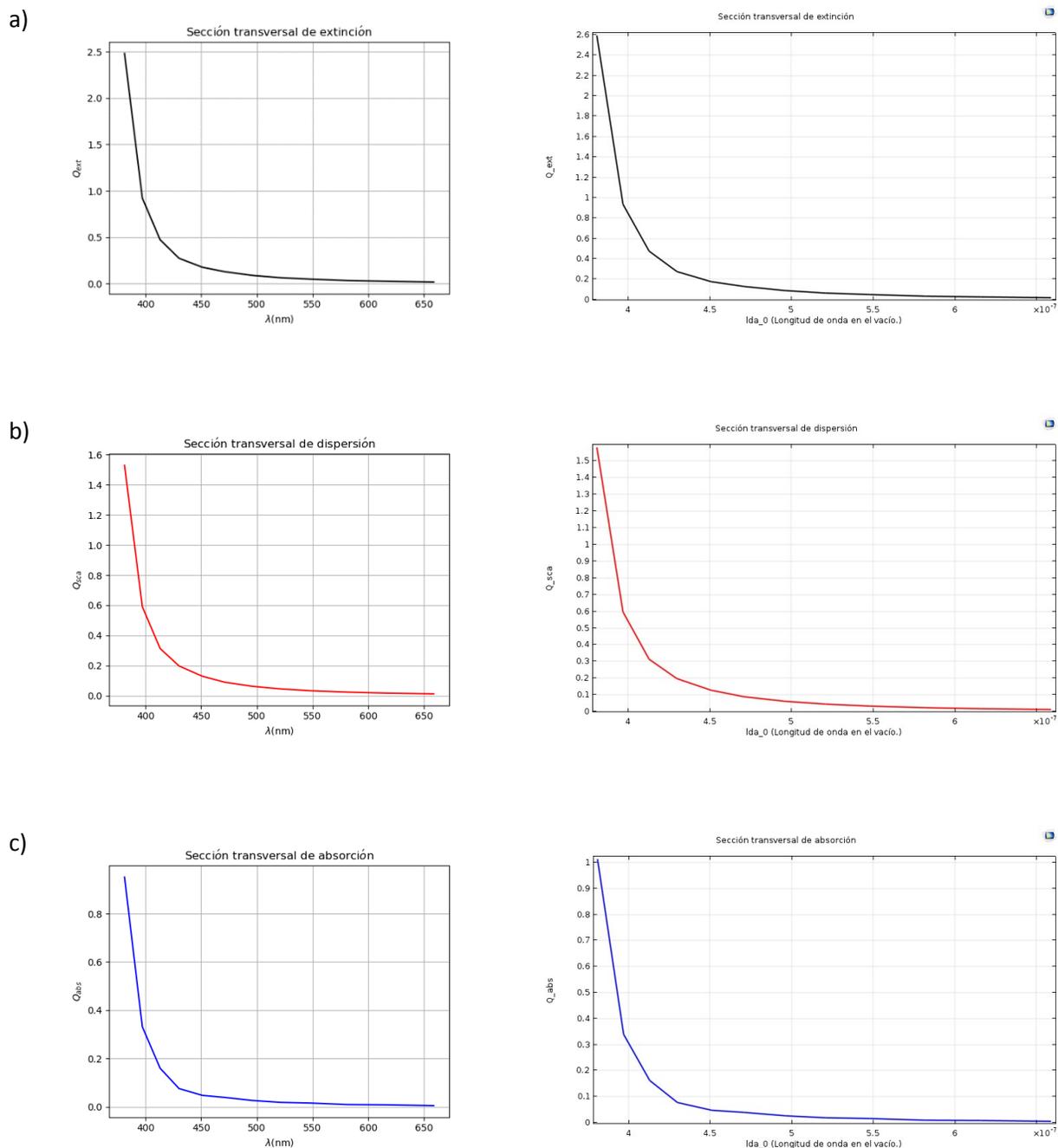


Figura 46. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 25nm de radio en aire.

Caso 8: Partícula esférica de oro con radio de 50 nm:

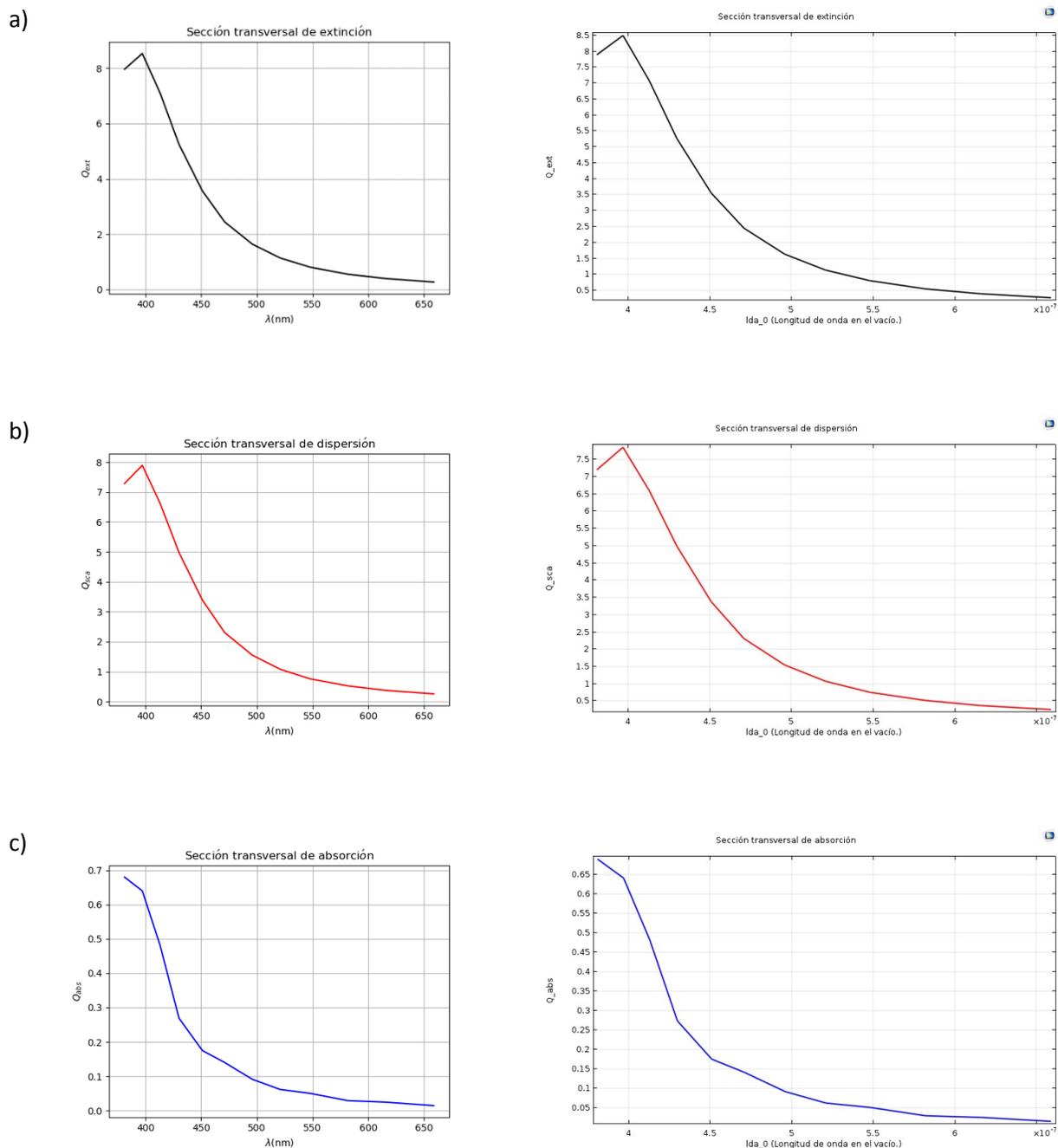


Figura 47. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 50nm de radio en aire.

Caso 9: Partícula esférica de plata con radio de 100 nm:

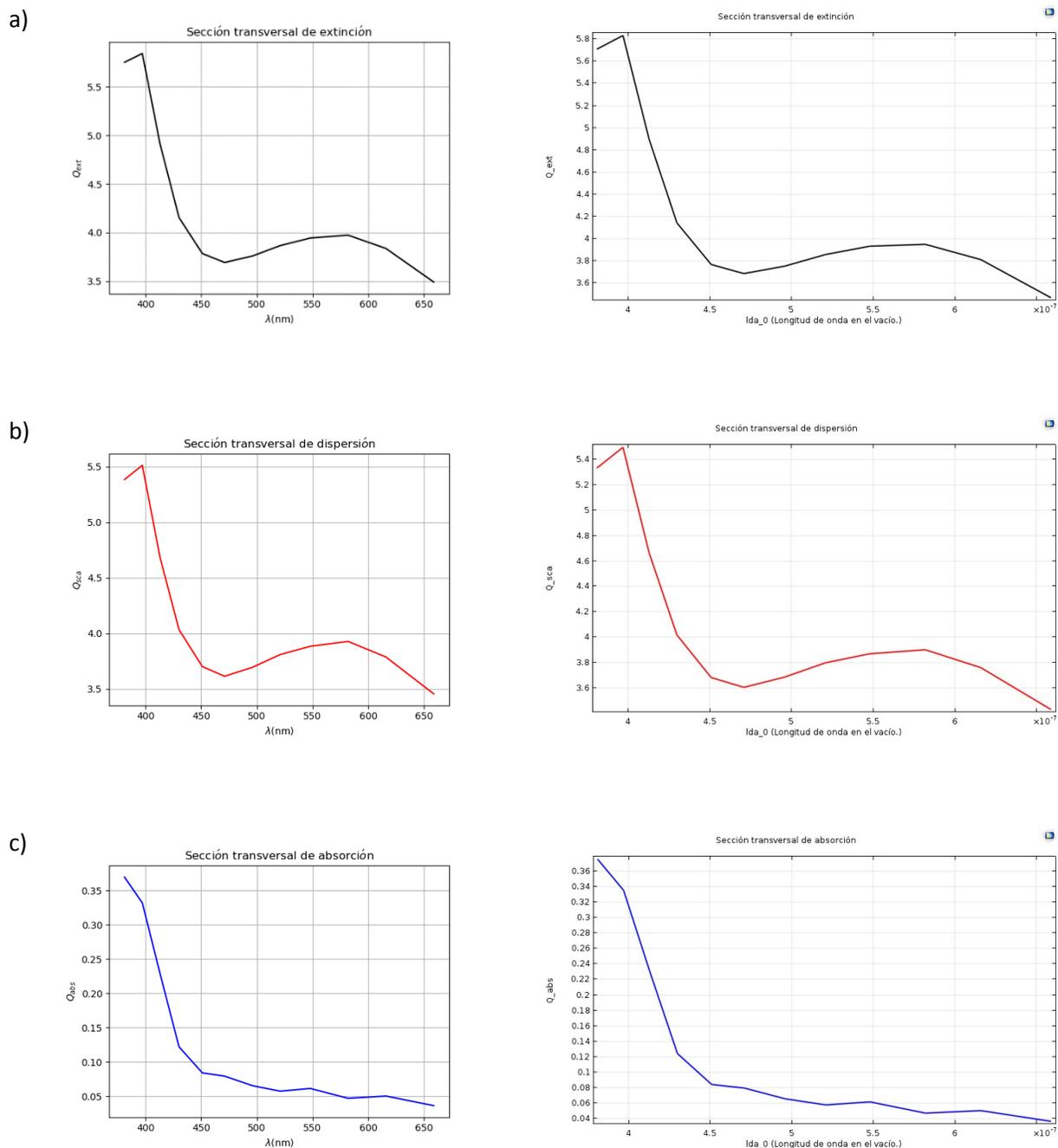


Figura 48. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 100nm de radio en aire.

Caso 10: Partícula esférica de plata con radio de 250 nm:

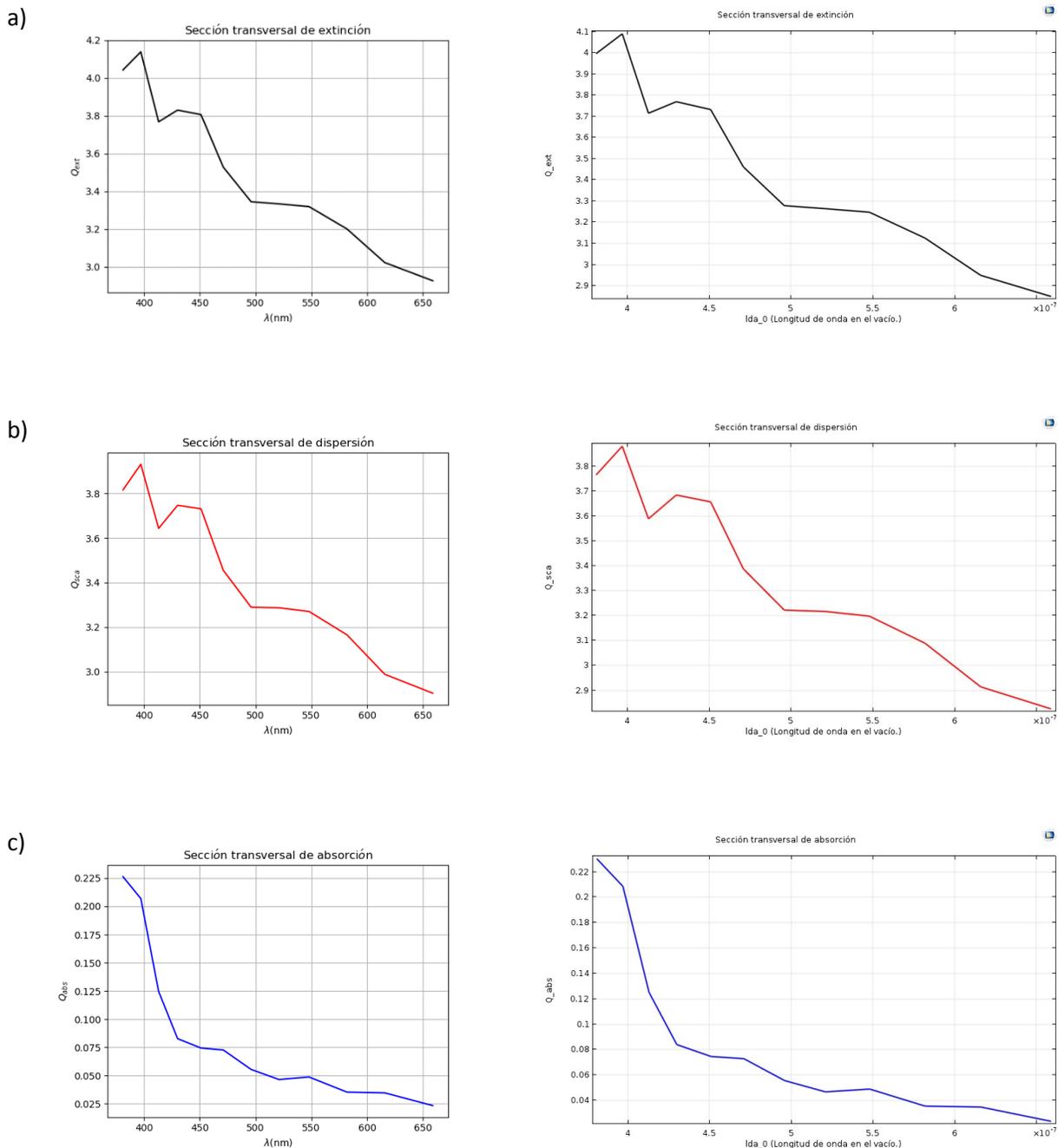


Figura 49. Gráficas mostrando la eficiencia para las secciones transversales de a) Extinción, b) dispersión y c) absorción. Todas las curvas en el lado izquierdo de la figura fueron obtenidas usando la teoría de Mie y las del lado derecho usando COMSOL para el caso de una partícula de plata con forma esférica de 250nm de radio en aire.