

Familiarización de la teoría de Mie y cálculo de las secciones transversales de extinción, absorción y esparcimiento

Atzin López Tercero¹

¹*Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México*

18 de octubre de 2024

1. Teoría de Mie

La teoría de Mie [1], desarrollada por el físico alemán Gustav Mie en 1908, representa una solución exacta a las ecuaciones de Maxwell para el problema del esparcimiento de luz por una partícula esférica de radio a . La partícula se encuentra inmersa en un medio conocido como matriz, que posee un índice de refracción N_2 . La partícula es iluminada por una onda electromagnética (EM) plana monocromática con una longitud de onda λ , cuya dirección de propagación es la dirección z . En este contexto, la teoría de Mie proporciona un marco teórico completo para el cálculo de las secciones transversales de extinción, absorción y esparcimiento, permitiendo un análisis detallado del comportamiento de la luz al interactuar con una partícula esférica inmersa en un medio homogéneo con índice de refracción arbitrario N_2 , como se muestra en la Fig. 1. El campo eléctrico incidente es

$$\mathbf{E}^i = (E_x^i \hat{\mathbf{e}}_x + E_y^i \hat{\mathbf{e}}_y) e^{i(kz - \omega t)}, \quad (1)$$

donde $k = 2\pi N_2/\lambda$ es el número de onda, y ω la frecuencia angular relacionados por la dispersión es $k = \omega/c$, donde c es la rapidez de la luz. En la Fig. 1 se muestra una partícula esférica localizada en el origen, iluminada por una onda EM plana monocromática [Ec. (1)]. La solución de Mie consiste en encontrar las soluciones para los campos electromagnéticos tanto en el interior de la partícula como en el medio en el que está inmersa. Se plantean soluciones para los campos eléctrico y magnético, fuera y dentro de la partícula, en coordenadas esféricas, es decir, en términos de los armónicos esféricos vectoriales, cuyos coeficientes se determinan a partir de las condiciones de frontera de los campos EMs sobre la superficie de la partícula.

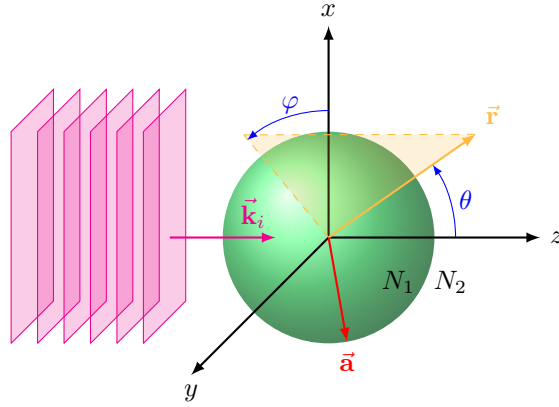


Fig. 1: Esfera de radio a e índice de refracción N_1 , inmersa en una matriz con índice N_2 . La esfera es iluminada por una onda plana de luz con vector de onda \mathbf{k}_i que viaja en la dirección $\hat{\mathbf{e}}_z$.

Con el propósito de desarrollar la solución de Mie, se parte de las ecuaciones de Maxwell, ya que con ellas se describe el comportamiento y la propagación de los campos electromagnéticos, y cómo son influenciados por fuentes externas [2]. Las ecuaciones de Maxwell están dadas por

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{ext}, \quad \text{Ley de Gauss eléctrica} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \text{Ley de Gauss magnética} \quad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \text{Ley de Faraday-Lenz} \quad (4)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_{ext} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \text{Ley de Ampère-Maxwell} \quad (5)$$

en donde ρ_{ext} corresponde a la densidad de carga volumétrica externa y \mathbf{J}_{ext} es la densidad de corriente volumétrica externa,

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (6)$$

es vector de desplazamiento, \mathbf{P} la polarización del material, y el campo \mathbf{H} , cuya relación con el campo magnético es

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}, \quad (7)$$

donde \mathbf{M} corresponde a la magnetización del medio material. Se considera una matriz simple (un medio lineal, homogéneo e isótropo) libre de cargas o corrientes externas, de modo que las Ecs. (2)-(5) se reescriben como

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (9)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (10)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (11)$$

Calculando el rotacional de las Ecs. (10) y (11), considerando las Ecs. (8) y (9) y las relaciones constitutivas

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad (12)$$

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0}, \quad (13)$$

se obtiene que los campos \mathbf{E} y \mathbf{H} deben satisfacer a la ecuación de Helmholtz vectorial

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \omega^2 \epsilon \mu \mathbf{E} = 0, \quad (14)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + \omega^2 \epsilon \mu \mathbf{H} = 0, \quad (15)$$

en donde $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$.

1.1. Armónicos esféricos vectoriales

Para encontrar una solución de Mie al problema de esparsamiento y absorción de luz por una partícula esférica, se expresan los campos eléctrico y magnético incidentes, \mathbf{E}^i y \mathbf{H}^i , en términos de la base esférica de modo que cumplan con las Ecs. (14) y (15).

Para proceder con el cálculo de los campos EMs y obtener la solución a la ecuación de Helmholtz, se propone un campo vectorial \mathbf{M} tal que

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi), \quad (16)$$

donde ψ es una función escalar y \mathbf{r} el vector posición; dado que \mathbf{M} es el rotacional de $\mathbf{r}\psi$, se cumple que $\nabla \cdot \mathbf{M} = 0$, y que \mathbf{M} y \mathbf{r} son vectores perpendiculares. La ecuación de Helmholtz para \mathbf{M} , dado que el operador laplaciano y el rotacional conmutan¹, usando la Ec. (16) para calcular la ecuación de Helmholtz para \mathbf{M} se obtiene

$$\nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M} = \nabla \times [\nabla^2 (\mathbf{r}\psi) + k^2 (\mathbf{r}\psi)],$$

¹Para un campo vectorial arbitrario $\vec{\mathbf{A}}$ se cumple que $\nabla^2 \vec{\mathbf{A}} = \nabla(\nabla \cdot \vec{\mathbf{A}}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{\mathbf{A}})$, por lo que el rotacional del laplaciano de $\vec{\mathbf{A}}$ es $\nabla \times (\nabla^2 \vec{\mathbf{A}}) = \nabla \times [\nabla(\nabla \cdot \vec{\mathbf{A}})] - \nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \vec{\mathbf{A}})] = -\nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \vec{\mathbf{A}})]$, pues el rotacional del gradiente de cualquier función es nulo. Además, al sustituir $\vec{\mathbf{A}} \rightarrow \nabla \times \vec{\mathbf{A}}$ en la expresión del laplaciano de $\vec{\mathbf{A}}$ y considerando que la divergencia del rotacional de cualquier función es nulo, se obtiene que $\nabla^2(\nabla \times \vec{\mathbf{A}}) = \nabla[\nabla \cdot (\nabla \times \vec{\mathbf{A}})] - \nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \vec{\mathbf{A}})] = -\nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \vec{\mathbf{A}})]$. Por tanto, ∇^2 y $\nabla \times$ con operadores que conmutan.

y dado que se cumple tanto $\nabla^2(\mathbf{r}\psi) = 2\nabla\psi + \mathbf{r}\nabla^2\psi$ como $\nabla \times (\nabla\psi) = 0$, la ecuación de Helmholtz para \mathbf{M} puede reescribirse como

$$\nabla^2\mathbf{M} + k^2\mathbf{M} = \nabla \times [\mathbf{r}(\nabla^2\psi + k^2\psi)]. \quad (17)$$

Adicional a \mathbf{M} , se define el vector \mathbf{N} como

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k}, \quad (18)$$

cuyo laplaciano es $\nabla^2\mathbf{N} = \nabla^2(\nabla \times \mathbf{M}/k) = \nabla \times (\nabla^2\mathbf{M}/k)$, y por tanto la ecuación de Helmholtz para \mathbf{N} es

$$\nabla^2\mathbf{N} + k^2\mathbf{N} = \nabla \times \left(\frac{\nabla^2\mathbf{M}}{k} \right) + k\nabla \times \mathbf{M} = \frac{1}{k}\nabla \times (\nabla^2\mathbf{M} + k^2\mathbf{M}). \quad (19)$$

De las Ecs. (17) y (19) se concluye que los campos \mathbf{M} y \mathbf{N} cumplen la ecuación de Helmholtz vectorial si, y sólo si, la función escalar ψ cumple con la ecuación de Helmholtz escalar. Si este es el caso, entonces, el rotacional de \mathbf{N} está dado por

$$\nabla \times \mathbf{N} = \nabla \times \left(\frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k} \right) = -\frac{\nabla^2\mathbf{M}}{k} = \frac{k^2\mathbf{M}}{k} = k\mathbf{M}. \quad (20)$$

Los campos vectoriales \mathbf{M} y \mathbf{N} son conocidos como los *armónicos esféricos vectoriales*, ψ como su función generadora y \mathbf{r} como el vector de guía. Los armónicos esféricos vectoriales \mathbf{M} y \mathbf{N} cumplen con tener divergencia nula y que el rotacional de uno es proporcional al otro [Ecs. (18) y (20)], es decir, que cumplen con las ecuaciones de Maxwell sin fuentes [Ecs. (8)-(11)] siempre que se cumpla que

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0. \quad (21)$$

Para encontrar las soluciones del campo esparcido por una esfera basta entonces con encontrar las soluciones de la Ec. (21). La función generadora de los armónicos vectoriales debe cumplir con la ecuación

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + k^2\psi = 0. \quad (22)$$

Para resolver la Ec. (22) se emplea el método de separación de variables, por lo que se propone que ψ sea el producto de tres funciones

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (23)$$

Sustituyendo la Ec. (23) en la Ec. (22), multiplicando por $r^2/R\Theta\Phi$ y despejando los términos que dependen únicamente de r , se obtiene como resultado que una función con dependencia radial es igual a una función con dependencia angular, por lo tanto se igualan a una constante $\ell(\ell+1)$, es decir

$$\overbrace{\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + k^2 r^2}^{\text{radial}} = \ell(\ell+1) = \underbrace{-\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}}_{\text{angular}}. \quad (24)$$

Separando la Ec. (24) en cada variable esférica, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + m^2 \Phi = 0, \quad (25)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0, \quad (26)$$

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

La Ec. (26) es la ecuación asociada de Legendre y la Ec. (27) es la ecuación asociada de Bessel. Dado que ψ debe ser una función con periodicidad 2π en φ , es decir que $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$, las soluciones linealmente independientes de la Ec. (25) son

$$\Phi_e(\varphi) = \cos(m\varphi), \quad (28)$$

$$\Phi_o(\varphi) = \sin(m\varphi), \quad (29)$$

con m un número natural (incluido el cero) y donde los subíndices e y o hacen referencia a que son funciones pares e impares, respectivamente. Para resolver la Ec. (26) se realiza el cambio de variable $\mu = \cos \theta$ y se reescribe como

$$(1 - \mu^2) \frac{d^2 \Theta}{d\mu^2} - 2\mu \frac{d\Theta}{d\mu} + \left[\ell(\ell + 1) - \frac{m^2}{(1 - \mu^2)} \right] \Theta = 0. \quad (30)$$

Es necesario que las soluciones sean finitas en $\theta = 0, \pi$ por lo que se consideran las funciones asociadas de Legendre de primer tipo P_n^m de grado n y orden m , donde $n = m + 1, \dots$ que además son ortogonales,

$$\int_{-1}^1 P_n^m(\mu) P_{n'}^m(\mu) d\mu = \delta_{n'n} \frac{2}{2n + 1} \frac{(n + m)!}{(n - m)!}. \quad (31)$$

Adicionalmente, las funciones $\sin(m\varphi)$ y $\cos(m\varphi)$ obedecen las relaciones de ortogonalidad

$$\int_0^{2\pi} \sin(m\varphi) \cos(m'\varphi) d\varphi = 0 \quad \forall m, m', \quad (32)$$

$$\int_0^{2\pi} \sin(m\varphi) \sin(m'\varphi) d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos(m\varphi) \cos(m'\varphi) d\varphi = \delta_{m,m'} \frac{\pi}{2}, \quad (33)$$

en donde $\delta_{m,m'}$ es la delta de Kronecker.

Para resolver la Ec. (27) se realiza el cambio de variable $\rho = kr$ y se define la función $Z = R\sqrt{\rho}$, por lo que la ecuación radial se reescribe como

$$\rho \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dZ}{d\rho} \right) + \left[\rho^2 - \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 \right] Z = 0, \quad (34)$$

cuyas soluciones son las funciones de Bessel de primer y segundo tipo J_v y Y_v donde $v = n + \frac{1}{2}$. Entonces las soluciones linealmente independientes son las funciones esféricas de Bessel:

$$j_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{n+1/2}(\rho), \quad (35a)$$

$$y_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} Y_{n+1/2}(\rho), \quad (35b)$$

que satisfacen las relaciones de recurrencia:

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

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

Como cualquier combinación de las soluciones anteriores es solución de la Ec. (34), las funciones esféricas de Bessel de tercer tipo (funciones de Hankel) son también soluciones:

$$h_n^{(1)}(\rho) = j_n(\rho) + i y_n(\rho), \quad (35e)$$

$$h_n^{(2)}(\rho) = j_n(\rho) - i y_n(\rho). \quad (35f)$$

Entonces, las funciones que satisfacen la ecuación de onda escalar en coordenadas esféricas son:

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

$$\psi_{omn} = \sin(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n(kr). \quad (36b)$$

Al emplear las Ecs. (36a) y (36b) en las Ecs. (16) y (18) se obtiene como resultado $\mathbf{M}_{em\ell}$ y $\mathbf{M}_{om\ell}$, dados por las expresiones

$$\mathbf{M}_{em\ell} = -m \sin(m\varphi) z_\ell(kr) \frac{P_\ell^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta - \cos(m\theta) z_\ell(kr) \frac{dP_\ell^m(\cos \theta)}{d\theta} \hat{\mathbf{e}}_\varphi, \quad (37)$$

$$\mathbf{M}_{om\ell} = m \cos(m\varphi) z_\ell(kr) \frac{P_\ell^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta - \sin(m\theta) z_\ell(kr) \frac{dP_\ell^m(\cos \theta)}{d\theta} \hat{\mathbf{e}}_\varphi. \quad (38)$$

Agrupando los términos que dependen de φ y kr y, dado que las funciones asociadas de Legendre satisfacen que

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0, \quad (39)$$

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} P_n^m(\cos \theta) \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} P_n^m(\cos \theta) = n(n+1) P_n^m(\cos \theta), \quad (40)$$

y $kr = \rho$, entonces

$$\frac{d}{dr}(r z_n(kr)) = \frac{d\rho}{dr} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{\rho}{k} z_n(\rho) \right) = \frac{d}{d\rho}(\rho z_n(\rho)). \quad (41)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{em\ell} = & \cos(m\varphi) \frac{z_\ell(kr)}{kr} \ell(\ell+1) P_\ell^m(\cos \theta) \hat{\mathbf{e}}_r \\ & + \cos(m\varphi) \frac{1}{kr} \frac{d}{d(kr)} \left[kr z_\ell(kr) \right] \frac{dP_\ell^m(\cos \theta)}{d\theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ & - m \sin(m\varphi) \frac{1}{kr} \frac{d}{d(kr)} \left[kr z_\ell(kr) \right] \frac{P_\ell^m(\cos \theta)}{\sin \theta}, \end{aligned} \quad (42a)$$

y de manera análoga,

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{om\ell} = & \sin(m\varphi) \frac{z_\ell(kr)}{kr} \ell(\ell+1) P_\ell^m(\cos \theta) \hat{\mathbf{e}}_r \\ & + \sin(m\varphi) \frac{1}{kr} \frac{d}{d(kr)} \left[kr z_\ell(kr) \right] \frac{dP_\ell^m(\cos \theta)}{d\theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ & + m \cos(m\varphi) \frac{1}{kr} \frac{d}{d(kr)} \left[kr z_\ell(kr) \right] \frac{P_\ell^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \hat{\mathbf{e}}_\varphi. \end{aligned} \quad (42b)$$

Como las soluciones obtenidas para los armónicos esféricos vectoriales son solución a la ecuación de Helmholtz, cualquier solución de los campos EMs puede escribirse como una serie en términos de las Ecs. (42a) y (42b), de esta manera se puede expandir una onda plana en términos de los armónicos esféricos vectoriales.

Una onda EM plana con longitud de onda λ , polarizada en la dirección x , de manera que caracteriza a un campo eléctrico \mathbf{E}_i , de magnitud \mathbf{E}_0 , que se propaga en la dirección z en un medio simple con índice de refracción N_2 , se expresa en la base esférica como

$$\vec{E}_i = E_0 e^{ikr \cos(\theta)} \hat{\mathbf{e}}_x, \quad (43)$$

donde, $\hat{\mathbf{e}}_x = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_r + \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_\theta - \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_\phi$.

El objetivo es calcular los coeficientes $A_{em\ell}$, $A_{om\ell}$, $B_{em\ell}$ y $B_{om\ell}$ tales que la Ec. (43) sea una combinación lineal de los armónicos esféricos vectoriales de la forma:

$$\vec{E}_i = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=n}^{\infty} (B_{em\ell} \mathbf{M}_{em\ell} + B_{om\ell} \mathbf{M}_{om\ell} + A_{em\ell} \mathbf{N}_{em\ell} + A_{om\ell} \mathbf{N}_{om\ell}). \quad (44)$$

Las funciones $\sin(m\varphi)$ y $\cos(m\varphi)$ obedecen las relaciones de ortogonalidad dadas por las Ecs. (32) y (33), por lo que el producto entre $\mathbf{M}_{em\ell}$ y $\mathbf{M}_{om'\ell'}$, y $\mathbf{N}_{em\ell}$ y $\mathbf{N}_{om'\ell'}$ es

$$\langle \mathbf{M}_{em\ell}, \mathbf{M}_{om'\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} = \langle \mathbf{N}_{em\ell}, \mathbf{N}_{om'\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} = 0 \quad \forall m, m', \ell, \ell', \quad (45)$$

y

$$\langle \mathbf{M}_{om\ell}, \mathbf{N}_{em'\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} = \langle \mathbf{M}_{om\ell}, \mathbf{N}_{om'\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} = \langle \mathbf{M}_{em\ell}, \mathbf{N}_{em'\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} = 0 \quad \forall m, m', \ell, \ell'. \quad (46)$$

Lo anterior implica que todos los armónicos esféricos vectoriales orden m distinto son ortogonales entre sí.

Los casos que dan lugar a la norma al cuadrado de cada armónico esférico vectorial, definida por el producto interior, son:

$$\langle \mathbf{M}_{em\ell}, \mathbf{M}_{em\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} = \langle \mathbf{M}_{om\ell}, \mathbf{M}_{om\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} = \delta_{\ell}^{\ell'} \pi z_{\ell}(\rho)^2 \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \quad \forall \ell, \ell', m, \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{N}_{em\ell}, \mathbf{N}_{em\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} &= \langle \mathbf{N}_{om\ell}, \mathbf{N}_{om\ell'} \rangle_{\theta, \varphi} \\ &= \delta_{\ell}^{\ell'} \pi \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \left\{ \left[\frac{z_{\ell}(\rho)}{\rho} \right]^2 \ell(\ell+1) + \left[\frac{1}{\rho} \frac{d[\rho z_{\ell}(\rho)]}{d\rho} \right]^2 \right\} \quad \forall \ell, \ell', m. \end{aligned} \quad (48)$$

Dado que en la componente radial hay dependencia de $\cos \varphi$, se sigue que $m = 1$ al comparar con las expresiones de $\mathbf{N}_{em\ell}$ y $\mathbf{N}_{om\ell}$ en las Ecs. (42a) y (42b), únicos elementos con componente radial, y además $A_{om\ell} = 0$ pues $\mathbf{N}_{om\ell}$ es proporcional a $\sin \varphi$ en la componente $\hat{\mathbf{e}}_{\phi}$, $B_{em\ell} = 0$ pues $\mathbf{M}_{em\ell}$ es proporcional a $\cos \varphi$. La onda plana no tiene ninguna divergencia, es decir, se trata de una onda transversal, por lo que se escoge $z_{\ell} = j_{\ell}$ ².

$$\mathbf{E}^i = \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[B_{o1\ell} \mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} + A_{e1\ell} \mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} \right], \quad (49)$$

con

$$\begin{aligned} B_{o1\ell} &= \frac{\langle \mathbf{E}^i, \mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} \rangle_{\theta, \varphi}}{\langle \mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)}, \mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} \rangle_{\theta, \varphi}} = i^{\ell} E_0 \frac{(2\ell+1)}{\ell(\ell+1)}, \\ A_{e1\ell} &= \frac{\langle \mathbf{E}^i, \mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} \rangle_{\theta, \varphi}}{\langle \mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)}, \mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} \rangle_{\theta, \varphi}} = -i^{\ell} E_0 \frac{(2\ell+1)}{\ell(\ell+1)}. \end{aligned} \quad (50)$$

Así,

$$\mathbf{E}^i = E_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} i^{\ell} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \left(\mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} - i \mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} \right). \quad (51a)$$

El campo magnético incidente se calcula empleando la Ley de Farady-Lenz, obteniendo :

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H} \Rightarrow \mathbf{H} = -\frac{i}{\omega\mu} \nabla \times \mathbf{E}, \quad (52)$$

entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_i &= -\frac{i}{\omega\mu} \nabla \times \mathbf{E}_i = -\frac{i}{\omega\mu} \nabla \times \left[E_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} i^{\ell} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \left(\mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} - i \mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} \right) \right] \\ &= -\frac{1}{\omega\mu} \nabla \times \left[E_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} i^{\ell} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \left(\mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} + i \mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} \right) \right] \\ &= -\frac{1}{\omega\mu} E_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} i^{\ell} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \nabla \times \left(\vec{N}_{e1\ell}^{(1)} + i \mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} \right) \\ &= -\frac{1}{\omega\mu} E_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} i^{\ell} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \left(\nabla \times \mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} + \nabla \times i \mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} \right), \end{aligned}$$

como $\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k}$ y $k\mathbf{M} = \nabla \times \mathbf{N}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_i &= -\frac{1}{\omega\mu} E_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} i^{\ell} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \left(k \mathbf{M}_{e1\ell}^{(1)} + i k \mathbf{N}_{o1\ell}^{(1)} \right), \\ &= -\frac{k}{\omega\mu} E_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} i^{\ell} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \left(\mathbf{M}_{e1\ell}^{(1)} + i \mathbf{N}_{o1\ell}^{(1)} \right). \end{aligned}$$

Por tanto,

$$\mathbf{H}_i = -\frac{k}{\omega\mu} E_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} i^{\ell} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \left(\mathbf{M}_{e1\ell}^{(1)} + i \mathbf{N}_{o1\ell}^{(1)} \right). \quad (53)$$

²Las funciones radiales que no divergen en el origen son las funciones esféricas de Bessel, por lo que se usa una expansión en términos de funciones de Bessel esféricas j_{ℓ} para representar el campo en la región donde no hay divergencia

De esta forma, la expansión del campo incidente $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$ está dada por:

$$\mathbf{E}_i = \sum_{\ell=1}^{\infty} E_{\ell} \left(\mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} - i\mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} \right), \quad (54a)$$

$$\mathbf{H}_i = -\frac{k_1}{\omega\mu_1} \sum_{\ell=1}^{\infty} E_{\ell} \left(\mathbf{M}_{e1\ell}^{(1)} + i\mathbf{N}_{o1\ell}^{(1)} \right). \quad (54b)$$

Para calcular los campos EMs esparcidos $(\mathbf{E}^s, \mathbf{H}^s)$ y los campos EMs dentro de la partícula esférica $(\mathbf{E}^p, \mathbf{H}^p)$, se emplean las condiciones a la frontera de los campos EMs en la superficie de la partícula esférica

$$(\mathbf{E}^i + \mathbf{E}^s - \mathbf{E}^p) \times \hat{\mathbf{e}}_r = (\mathbf{H}^i + \mathbf{H}^s - \mathbf{H}^p) \times \hat{\mathbf{e}}_r = \mathbf{0}. \quad (55)$$

De las Ecs. (54a) y (54b), para \mathbf{E}_i , y \mathbf{H}_i , y de las condiciones a la frontera, Ec. (55), se deduce que en la expansión de los campos EMs esparcidos, y los internos, los coeficientes para $m \neq 1$ son nulos. Los campos EMs dentro de la partícula $(\mathbf{E}^p, \mathbf{H}^p)$ son finitos en la esfera, por lo que se emplea como solución a la ecuación radial las funciones $j_{\ell}(k_p r)$, con $k_p = 2\pi N_1/\lambda$ el número de onda dentro de la esfera. Las expresiones para los campos EMs están dados por:

$$\mathbf{E}^p = \sum_{\ell=1}^{\infty} E_{\ell} \left(c_{\ell} \mathbf{M}_{o1\ell}^{(1)} - i d_{\ell} \mathbf{N}_{e1\ell}^{(1)} \right), \quad (56a)$$

$$\mathbf{H}^p = \frac{-k_p}{\omega\mu_p} \sum_{\ell=1}^{\infty} E_{\ell} \left(d_{\ell} \mathbf{M}_{e1\ell}^{(1)} + i c_{\ell} \mathbf{N}_{o1\ell}^{(1)} \right), \quad (56b)$$

con $E_{\ell} = E_0 i^{\ell} (2\ell + 1) / [\ell(\ell + 1)]$.

Para los campos esparcidos $(\mathbf{E}^s, \mathbf{H}^s)$ las funciones j_{ℓ} y y_{ℓ} no tienen puntos indeterminados, por lo que se emplean las funciones esféricas de Hankel $h_{\ell}^{(1)}$ y $h_{\ell}^{(2)}$, que en su límite asintótico ($\ell^2 \ll kr$), están dadas por [3]:

$$h_{\ell}^{(1)}(k_m r) \approx (-i)^{\ell} \frac{e^{ik_m r}}{ik_m r},$$

$$h_{\ell}^{(2)}(k_m r) \approx -i^{\ell} \frac{e^{-ik_m r}}{ik_m r},$$

por lo que $h_{\ell}^{(1)}$ corresponde a una onda esférica saliente, y $h_{\ell}^{(2)}$ a una entrante. Dado que el campo esparcido es una onda saliente, se emplea $h_{\ell}^{(1)}$ como solución radial a la función generadora de los armónicos esféricos vectoriales. Entonces, los campos EMs esparcidos $(\mathbf{E}^s, \mathbf{H}^s)$ son

$$\mathbf{E}^s = \sum_{\ell=1}^{\infty} E_{\ell} \left(i a_{\ell} \mathbf{N}_{e1\ell}^{(3)} - b_{\ell} \mathbf{M}_{o1\ell}^{(3)} \right), \quad (57a)$$

$$\mathbf{H}^s = \frac{k}{\omega\mu} \sum_{\ell=1}^{\infty} E_{\ell} \left(i b_{\ell} \mathbf{N}_{o1\ell}^{(3)} + a_{\ell} \mathbf{M}_{e1\ell}^{(3)} \right), \quad (57b)$$

donde ahora el superíndice (3) en los armónicos esféricos vectoriales denota a $h_{\ell}^{(1)}$ como solución a la parte radial. Los coeficientes a_{ℓ} , b_{ℓ} , c_{ℓ} y d_{ℓ} son constantes de proporcionalidad. Notando que en las ecuaciones de los campos EM involucrados (51a), (54b), (56a), (56b), (57a) y (57b) el coeficiente es $m = 1$, conviene definir las funciones

$$\pi_{\ell}(\cos \theta) = \frac{P_{\ell}^1(\cos \theta)}{\sin \theta}, \quad (58a)$$

$$\tau_{\ell}(\cos \theta) = \frac{dP_{\ell}^1(\cos \theta)}{d\theta}, \quad (58b)$$

para expresar la dependencia angular polar en los armónicos esféricos vectoriales. Las relaciones de recurrencia de las funciones asociadas de Legendre [4] permiten expresar a π_{ℓ} y τ_{ℓ} como [3]

$$\pi_{\ell}(\mu) = \frac{2\ell - 1}{\ell - 1} \mu \pi_{\ell-1}(\mu) - \frac{\ell}{\ell - 1} \pi_{\ell-2}(\mu), \quad (59)$$

$$\tau_{\ell}(\mu) = \ell \mu \pi_{\ell}(\mu) - (\ell + 1) \pi_{\ell-1}(\mu), \quad (60)$$

en donde se empleó el cambio de variable $\mu = \cos \theta$ y se define $\pi_0 = 0$ y $\pi_1 = 1$. Las funciones π_ℓ y τ_ℓ son funciones pares e impares, respectivamente, y a pesar de no ser ortogonales, sí lo son la suma aritmética de ellas, es decir

$$\int_{-1}^1 [\tau_\ell(\mu) \pm \pi_\ell(\mu)][\tau_{\ell'}(\mu) \pm \pi_{\ell'}(\mu)] d\mu = 0, \quad \ell \neq \ell'. \quad (61)$$

Para determinar los coeficientes a_ℓ, b_ℓ, c_ℓ y d_ℓ de las Ecs. (56a), (56b), (57a) y (57b), se emplean las condiciones a la frontera, Ec. (55), por lo que se deben de satisfacer las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} E_\theta^i + E_\theta^s &= E_\theta^p, \\ E_\varphi^i + E_\varphi^s &= E_\varphi^p, \\ H_\theta^i + H_\theta^s &= H_\theta^p, \\ H_\varphi^i + H_\varphi^s &= H_\varphi^p, \end{aligned}$$

en $r = a$, que es la superficie de la partícula esférica. Al emplear la ortogonalidad de las funciones $\sin \varphi$ y $\cos \varphi$ [Ecs. (32) y (33)], reescribir los armónicos esféricos vectoriales en términos de π_ℓ y τ_ℓ y emplear la ortogonalidad de $\tau_\ell \pm \pi_\ell$, junto con las expresiones de los campos EMs de la onda plana incidente [Ecs. (54a) y (54b)], de los campos EMs dentro de la partícula [Ecs. (56a) y (56b)] y los campos EMs esparcidos [Ecs. (57a) y (57b)], se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} j_\ell(Nx)c_\ell + h_\ell^{(1)}(x)b_\ell &= j_\ell(x), \\ \mu_m[Nj_\ell(Nx)]'c_\ell + \mu_p[xh_\ell^{(1)}(x)]'b_\ell &= \mu_p[xj_\ell(x)]', \\ \mu_m Nj_\ell(Nx)d_\ell + \mu_p h_\ell^{(1)}(x)a_\ell &= \mu_p j_\ell(x), \\ [Nj_\ell(Nx)]'d_\ell + N[xh_\ell^{(1)}(x)]'a_\ell &= N[xj_\ell(x)]', \end{aligned}$$

en donde ' denota la derivada respecto al argumento de las funciones de Bessel, $x = k_2 a = 2\pi N_2 a / \lambda$ es el parámetro de tamaño y $N = N_1 / N_2$ es el índice de refracción relativo entre la partícula y la matriz. La solución para los coeficientes a_ℓ y b_ℓ , los coeficientes de los campo EMs esparcidos³, son

$$a_\ell = \frac{\mu_m N^2 j_\ell(Nx)[xj_\ell(x)]' - \mu_p j_\ell(x)[Nxj_\ell(x)]'}{\mu_m N^2 j_\ell(Nx)[xh_\ell^{(1)}(x)]' - \mu_p h_\ell^{(1)}(x)[Nxj_\ell(Nx)]'}, \quad (62a)$$

$$b_\ell = \frac{\mu_p Nj_\ell(Nx)[xj_\ell(x)]' - \mu_m j_\ell(x)[Nxj_\ell(x)]'}{\mu_p j_\ell(Nx)[xh_\ell^{(1)}(x)]' - \mu_m h_\ell^{(1)}(x)[Nxj_\ell(Nx)]'}. \quad (62b)$$

Sin embargo, para el caso en el que la partícula esférica no es magnética, es decir $n_p = \sqrt{\varepsilon_p / \varepsilon_0}$, las Ecs. (62) se reescriben como

$$a_\ell = \frac{N\psi_\ell(Nx)\psi_\ell'(x) - \psi_\ell(x)\psi_\ell'(Nx)}{N\psi_\ell(Nx)\xi_\ell'(x) - \xi_\ell(x)\psi_\ell'(Nx)}, \quad (63a)$$

$$b_\ell = \frac{\psi_\ell(Nx)\psi_\ell'(x) - N\psi_\ell(x)\psi_\ell'(Nx)}{\psi_\ell(Nx)\xi_\ell'(x) - N\xi_\ell(x)\psi_\ell'(Nx)}, \quad (63b)$$

en donde $\psi_\ell(\rho) = \rho j_\ell(\rho)$ y $\xi_\ell(\rho) = \rho h_\ell^{(1)}(\rho)$ son las funciones de Riccati-Bessel [3, 4] y los términos ψ_ℓ' y ξ_ℓ' denotan las derivadas de las funciones respecto a su argumento. Los armónicos esféricos vectoriales representan una expansión multipolar del campo eléctrico esparcido por una partícula esférica y los coeficientes de Mie [Ecs. (63a) y (63b)] modulan la contribución al campo total esparcido de cada término: a_ℓ , los multipolos eléctricos; b_ℓ , los magnéticos [5].

1.2. Extinción, esparcimiento y absorción

Para calcular el esparcimiento y la absorción de una partícula esférica que es iluminada con una onda EM monocromática, se calcula la tasa total de energía electromagnética que atraviesa una superficie S esférica (radio R) concéntrica a la partícula, usando el vector de Poynting \mathbf{S} . El vector de Poynting, describe el flujo de energía de la luz a través de un espacio y medio específico. Al analizar el vector de Poynting, se puede cuantificar la extinción, el esparcimiento y la absorción de la luz. En la sección anterior se obtuvieron los coeficientes del campo de esparcimiento a_n y b_n , por lo que ahora es posible calcular las *secciones transversales*.

³Las expresiones de los coeficientes para los campos EMs dentro de la partícula esférica son

$$c_\ell = \frac{\mu_p j_\ell(x)[xh_\ell^{(1)}(x)]' - \mu_p h_\ell^{(1)}(x)[xj_\ell(x)]'}{\mu_p j_\ell(Nx)[xh_\ell^{(1)}(x)]' - \mu_m h_\ell^{(1)}(x)[Nxj_\ell(Nx)]'} \quad \text{y} \quad d_\ell = \frac{\mu_p Nj_\ell(x)[xh_\ell^{(1)}(x)]' - \mu_p N h_\ell^{(1)}(x)[xj_\ell(x)]'}{\mu_m N^2 j_\ell(Nx)[xh_\ell^{(1)}(x)]' - \mu_p h_\ell^{(1)}(x)[Nxj_\ell(Nx)]'}.$$

Secciones Transversales

Para calcular las secciones transversales se parte del vector de Poynting,

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) = \frac{1}{2} \text{Re}[(\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_s) \times (\mathbf{H}_i + \mathbf{H}_s)^*], \quad (64)$$

donde $\text{Re}(\cdot)$ denota la parte real y desarrollando se obtiene que

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_i^* + \mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s^* + \mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_s^* + \mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_i^*). \quad (65)$$

Así, es posible relacionar cada término de la siguiente manera: $\mathbf{S} = \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_s + \mathbf{S}_e$, donde cada elemento de la ecuación corresponde a cada elemento de la Ec. (65) del mismo color. De esta manera, se puede determinar la energía electromagnética (W_a) que cruza una esfera imaginaria centrada en la partícula:

$$W_a = - \int_S \mathbf{S} \cdot d\vec{a} = - \int_S (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_s + \mathbf{S}_e) \cdot d\vec{a} = W_i + W_e - W_s. \quad (66)$$

Suponiendo que el medio en el que se encuentra la partícula es no absorbente, W_i será cero. Así mismo, W_a no dependerá del radio de la esfera imaginaria, por lo cual puede hacerse una aproximación de campo lejano. Para calcular la energía de esparcimiento y de extinción, respectivamente, se deben resolver la siguientes integrales:

$$W_s = \frac{1}{2} \text{Re} \left(\int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{s,\theta} H_{s,\phi}^* - E_{s,\phi} H_{s,\theta}^*) r^2 \sin \theta d\theta d\phi \right), \quad (67)$$

$$W_e = \frac{1}{2} \text{Re} \left(\int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{i,\phi} H_{s,\theta}^* - E_{i,\theta} H_{s,\phi}^* - E_{s,\theta} H_{i,\phi}^* + E_{s,\phi} H_{i,\theta}^*) r^2 \sin \theta d\theta d\phi \right), \quad (68)$$

donde $*$ denota el complejo conjugado, pues se considera como definición del vector de Poynting [3] :

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*). \quad (69)$$

La solución a estas integrales es:

$$W_s = \frac{\pi |E_0|^2}{\omega \mu k} \sum_{n,m=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (70)$$

y

$$W_e = \frac{\pi |E_0|^2}{\omega \mu k} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n). \quad (71)$$

Se define a la **sección transversal** como la razón

$$C_e = \frac{W_e}{I_i}, \quad (72)$$

donde I_i es la irradiancia del campo incidente definida como $I_i = \langle \mathbf{S}_i \rangle \cdot \hat{\mathbf{e}}_r = \frac{1}{2} \text{Re}\{\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_i^*\} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r$, es decir, la componente radial de \mathbf{S} . Por lo tanto, se definen a las secciones transversales de esparcimiento y extinción como

$$C_s = \frac{W_s}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (73)$$

y

$$C_e = \frac{W_e}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n). \quad (74)$$

El teorema óptico también establece que la extinción sólo depende de la amplitud de esparcimiento en la dirección de propagación, por lo que se puede relacionar la sección transversal de extinción con la de absorción y esparcimiento de la forma [3]:

$$C_e = C_s + C_a. \quad (75)$$

Las secciones transversales tienen unidades de área y al normalizarlas con el área transversal que proyecta la partícula (πa^2), se definen los cocientes de la secciones transversales de extinción C_e , esparcimiento C_s y absorción C_a como las eficiencias de extinción Q_e , esparcimiento Q_s y absorción Q_a , respectivamente.

2. Resonancias plasmónicas

En un metal, los electrones de conducción pueden considerarse como un *gas de electrones* libres que se mueven en un fondo de iones positivos. Cuando un campo EM externo incide sobre este *gas de electrones*, los electrones libres pueden oscilar colectivamente, estas oscilaciones colectivas de los electrones se conocen como *plasmones* (modos normales de oscilación de la carga inducida). Se clasifican en dos tipos: de bulto y de superficie [6]. El primero corresponde a las oscilaciones de los electrones dentro del material y está caracterizado por la frecuencia de plasma ω_p . La característica de las ondas EM transversales con frecuencia $\omega < \omega_p$ es que no pueden propagarse en el material caracterizado por ω_p , reflejando la luz debido a que los electrones en el metal apantallan el campo EM incidente. Sólo si $\omega > \omega_p$ la onda transversal puede viajar a través del material, pues la respuesta de los electrones del metal no es suficientemente rápida para apantallar el campo EM incidente. En la mayoría de los metales la frecuencia de plasma se encuentra en el ultravioleta, caracterizándolos como materiales brillantes en el rango visible de la luz.

Por otra parte, no hay un único plasmón de superficie característico del material. Existe una infinidad y se dividen a su vez en dos tipos: los que se localizan en nanopartículas (NP) y los que se propagan en interfaces. En el caso de NP ($a \leq \lambda$), el campo eléctrico asociado a la luz incidente polariza el metal, modelado como un gas de electrones, dando lugar a frecuencias de resonancia a las que se mueve la nube electrónica de manera armónica y colectiva, llamadas resonancias plasmónicas de superficie localizadas.

3. Modelo de Drude

El modelo de Drude es una aproximación para describir la respuesta dieléctrica de materiales conductores. En este modelo, se considera al material conductor como un *gas de electrones*, que no interactúan entre sí y no sienten fuerzas de restitución debido a la estructura del material. La expresión para la función dieléctrica del metal dada por el modelo de Drude es [7]

$$\frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (76)$$

donde ω_p y γ son la frecuencia de plasma y la constante de amortiguamiento de los electrones libres en el material, respectivamente. γ es un parámetro fenomenológico que describe cuán frecuentemente los electrones en un metal colisionan con los átomos del material o con otras imperfecciones, mientras que ω es la frecuencia angular de la onda EM que excita al metal.

El metal que mejor es representado por el modelo de Drude es el aluminio, con parámetros $\hbar\omega_p = 13.144$ eV y $\hbar\gamma = 0.197$ eV [8]. En la Fig. 2 se muestra el comportamiento de la parte real y la parte imaginaria de la función dieléctrica $\epsilon(\omega)$, en función de la energía $\hbar\omega$, dada por el modelo de Drude para el caso particular del aluminio. La parte real (curva azul) es una función creciente que cambia de signo cuando la frecuencia es cercana a la frecuencia de plasma ω_p con un comportamiento asintótico a $\text{Re}[\epsilon] = 1$ para frecuencias altas. Debido a que las frecuencias de la luz visible están por debajo de ω_p , $\text{Re}[\epsilon]$ es negativa y grande en este rango, resultando en una alta reflectividad. La parte imaginaria (curva naranja) es una función decreciente que siempre es positiva y asintótica a $\text{Im}[\epsilon] = 0$ en el límite $\omega \rightarrow \infty$, indicando que la absorción es baja y la mayoría de la energía de la luz es reflejada.

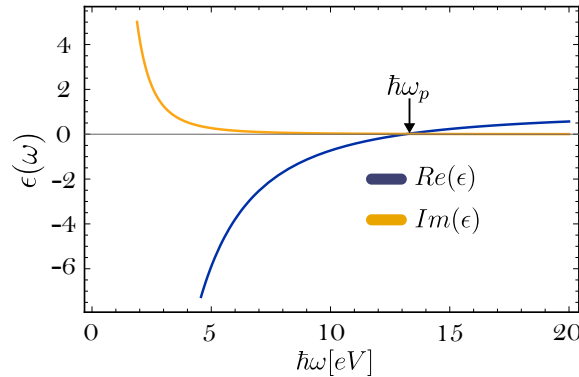


Fig. 2: Parte real (línea azul) y parte imaginaria (línea naranja) de la función dieléctrica del aluminio modelada como un material tipo Drude. La frecuencia a la cual se intersecan ambas curvas es cercana a la frecuencia de plasma que en caso del aluminio es $\hbar\omega_p = 13.144$ eV [8]. La función dieléctrica es la relativa (normalizada por la del vacío), resultando una cantidad adimensional.

4. Límite de partícula pequeña

El análisis de las secciones transversales permite conocer el tipo de respuesta EM de la partícula al ser iluminada con luz monocromática caracterizada por una frecuencia angular ω o energía asociada $\hbar\omega$. Los coeficientes de Mie a_ℓ y b_ℓ están asociados a la respuesta eléctrica y magnética del multipolo de orden ℓ , respectivamente: a_1 corresponde a la contribución del dipolo eléctrico mientras que b_1 a la contribución del dipolo magnético, a_2 y b_2 están asociados a la contribución cuadrupolar eléctrica y magnética, respectivamente, y así sucesivamente con el resto de multipolos. Para identificar cuándo un multipolo tiene mayor contribución sobre los demás en la respuesta EM, es necesario maximizar los coeficientes de Mie, este efecto es la resonancia mencionado anteriormente.

Dada una partícula de radio fijo, al analizar las Ecs. (63a) y (63b), se observa que la resonancia se cumple cuando alguno de los denominadores es cercano a cero, siendo predominante el multipolo eléctrico de orden ℓ cuando

$$N\psi_\ell(Nx)\xi'_\ell(x) = \xi_\ell(x)\psi'_\ell(Nx), \quad (77)$$

mientras que predomina el multipolo magnético de orden ℓ cuando

$$\psi_\ell(Nx)\xi'_\ell(x) = N\xi_\ell(x)\psi'_\ell(Nx). \quad (78)$$

Para calcular las resonancias que exciten el multipolo de orden 1 eléctrico o magnético se resuelven las Ecs. (77) o (78), respectivamente, sin embargo, no es posible calcular las frecuencias que cumplen las condiciones de resonancia de manera analítica debido a que están en términos de funciones de Riccati-Bessel. Sin embargo, existe una aproximación para la cual se obtiene una expresión simple para calcular las resonancias de los multipolos eléctricos: el límite de partícula pequeña. Se considera el radio de la partícula esférica mucho menor que la longitud de onda de la luz incidente. Tal es el caso de las nanopartículas ($a \ll \lambda$). En términos del parámetro de tamaño, cuando $x = ka = 2\pi \frac{a}{\lambda} \ll 1$, las funciones esféricas de Bessel son aproximadas por [3]:

$$j_\ell(x) \approx \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!}, \quad (79a)$$

$$h_\ell^{(1)} \approx -i \frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}}. \quad (79b)$$

Aproximando la Ec. (77) usando las Ecs. (79a) y (79b), se obtiene:

$$N_\ell^2 \frac{(N_\ell^\ell)}{(2\ell+1)!!} \left\{ x \left[-i \frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \right] \right\}' = -i \frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \left[N_\ell x \frac{(N_\ell x)^\ell}{(2\ell+1)!!} \right]'. \quad (80)$$

Considerando que $(2\ell+1)!!$ y $(2\ell-1)!!$ son constantes diferentes de cero:

$$N_\ell^2 (N_\ell)^\ell \left[\frac{1}{x^\ell} \right]' = \frac{1}{x^{\ell+1}} [(N_\ell x)^{\ell+1}]', \quad (81a)$$

$$N_\ell^2 (N_\ell)^\ell \frac{-\ell}{x^{\ell+1}} = \frac{1}{x^{\ell+1}} (\ell+1) (N_\ell x)^\ell, \quad (81b)$$

$$N_\ell^2 = -\frac{\ell+1}{\ell}, \quad (81c)$$

donde, por definición $N = \frac{N_1}{N_2}$, $N_1 = \sqrt{\epsilon_1}$ y $N_2 = \sqrt{\epsilon_2}$ son los índices de refracción de la NP y de la matriz que la rodea, respectivamente. Por lo tanto, si se considera una matriz de aire:

$$\epsilon(\omega_\ell) = -\frac{\ell+1}{\ell}. \quad (82)$$

Igualando la Ec. (82) con la Ec. (76) se obtiene una ecuación para calcular la frecuencia ω_ℓ que excita el multipolo eléctrico de orden ℓ :

$$-\frac{\ell+1}{\ell} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (83a)$$

$$\frac{2\ell+1}{\ell} = \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (83b)$$

$$\omega_\ell^2 + i\gamma\omega_\ell - \omega_p^2 \frac{1}{2\ell+1} = 0. \quad (83c)$$

y separando en parte real y parte imaginaria, $\omega_\ell = \omega'_\ell + i\omega''_\ell$, se obtiene la frecuencia del ℓ -ésimo modo multipolar

$$\omega'_\ell = \omega_p \sqrt{\frac{\ell}{2\ell+1} - \left(\frac{\gamma}{2\omega_p}\right)^2}, \quad (84a)$$

$$\omega''_\ell = -\frac{\gamma}{2}. \quad (84b)$$

Considerando únicamente la parte real y aproximando $\gamma \ll \omega_p$, la frecuencia de resonancia plasmónica es, aproximadamente

$$\omega_\ell \approx \omega_p \sqrt{\frac{\ell}{2\ell+1}}. \quad (85)$$

De la aproximación, Ec. (85), es inmediato que las resonancias están en un intervalo dado por $\ell = 1$, que corresponde al plasmón dipolar, y $\ell \rightarrow \infty$, que corresponde al plasmón de superficie⁴. En tal caso

$$\omega_\ell \in \left[\frac{\omega_p}{\sqrt{3}}, \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \right]. \quad (86)$$

4.1. Cálculos de secciones transversales

4.1.1. Aluminio

Como se mencionó en la sección 3, el material que mejor representa la función dieléctrica dada por el modelo de Drude es el aluminio. Utilizando valores previamente reportados para su frecuencia de plasma $\hbar\omega_p = 13.144$ eV y su constante de amortiguamiento fenomenológica $\hbar\gamma = 0.197$ eV [8], en la Fig. 3 se muestran la eficiencias de extinción, absorción y esparcimiento para una NP de aluminio inmersa en una matriz de aire ($N_2 = 1$) en función de su radio a de 5 nm, 10 nm y 20 nm y un rango de energías $\hbar\omega \in [4, 10]$ eV.

En la Fig. 3, se observa que el aumento del radio implica la aparición de modos de resonancia plasmónica de orden superior, es decir, multipolos de mayor orden también contribuyen a la extinción del campo EM, como se observa en las figuras 3b) y 3c), además, en general, el aumentar el radio produce que la principal contribución a la extinción sea el esparcimiento, predominando el aporte al campo electromagnético de un multipolo. Por otra parte, reducir el radio de la partícula, produce un aumento en el proceso de absorción, como se observa en la figura 3a). En el caso particular de las resonancias, para la figura 3a) (radio de 5 nm) la resonancia correspondiente al dipolo eléctrico se encuentra alrededor de 7.5 eV, para la figura 3b) (radio de 10 nm) se observa el dipolo eléctrico localizado alrededor de 7.2 eV y se alcanza a notar el cuadrupolo eléctrico cerca de 8.1 eV y en la figura 3c) (radio de 20 nm) se observa al dipolo eléctrico alrededor de 6.5 eV y se aprecia de mejor manera al cuadrupolo eléctrico aproximadamente en 7.9 eV, así como otra resonancia cerca de 8.2 eV. Es en estos máximos donde las oscilaciones de los electrones están en fase con el campo EM incidente, resultando en una amplificación de la respuesta del material.

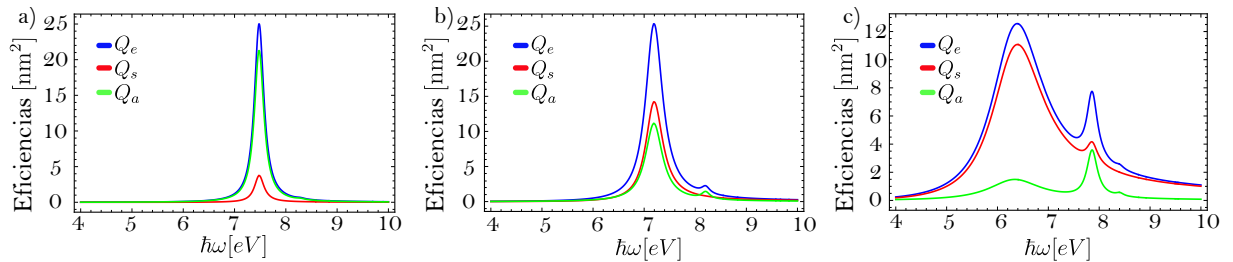


Fig. 3: Eficiencias extinción, absorción y esparcimiento de una NP aluminio modelada con Drude ($\hbar\omega_p = 13.144$ eV y $\hbar\gamma = 0.197$ eV) en función de la energía $\hbar\omega$, para un radio a) 5 nm, b) 10 nm y c) 20 nm.

4.1.2. Oro, plata, silicio y carburo de silicio

Usando datos experimentales de la función dieléctrica del oro [9], plata [10], silicio y carburo de silicio [11], en las Figs. 4 y 5 se muestran las eficiencias de extinción, absorción y esparcimiento en función de la energía asociada a la luz incidente $\hbar\omega$, para una NP de radios: 5 nm, 10 nm y 20 nm, inmersas en una matriz de aire ($N_2 = 1$).

⁴Al considerar plasmones de superficie, los cuales están confinados a la superficie del metal, y hacer una aproximación de partícula pequeña, se tiene que el límite dado en $\frac{\omega_p}{\sqrt{3}}$ corresponde al modo dipolar, y el límite $\frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$ corresponde al plasmón de superficie de superficie, esto corresponde a cuando el radio de la NP tiende a infinito, es decir, cuando se trata de un plano.

Para los materiales plasmónicos (oro y plata) estudiados, en la Fig. 4 se observan máximos en las eficiencias donde la mayor contribución a la extinción es la absorción (en este caso, la curva verde coincide con la curva azul debido a que el esparcimiento es prácticamente cero). En las resonancias plasmónicas multipolares localizadas alrededor de 2.5 eV, en la figura 4a) para el oro (renglón superior) y en 3.5 eV en la figura 5a) para la plata (renglón inferior), el efecto de absorción sigue siendo el predominante en la extinción del campo EM para la NP. Se observa, en la figura 4c) y 5c) (radio de 20 nm) una mayor contribución al esparcimiento relativo (comienza a diferenciarse entre la curva verde y azul).

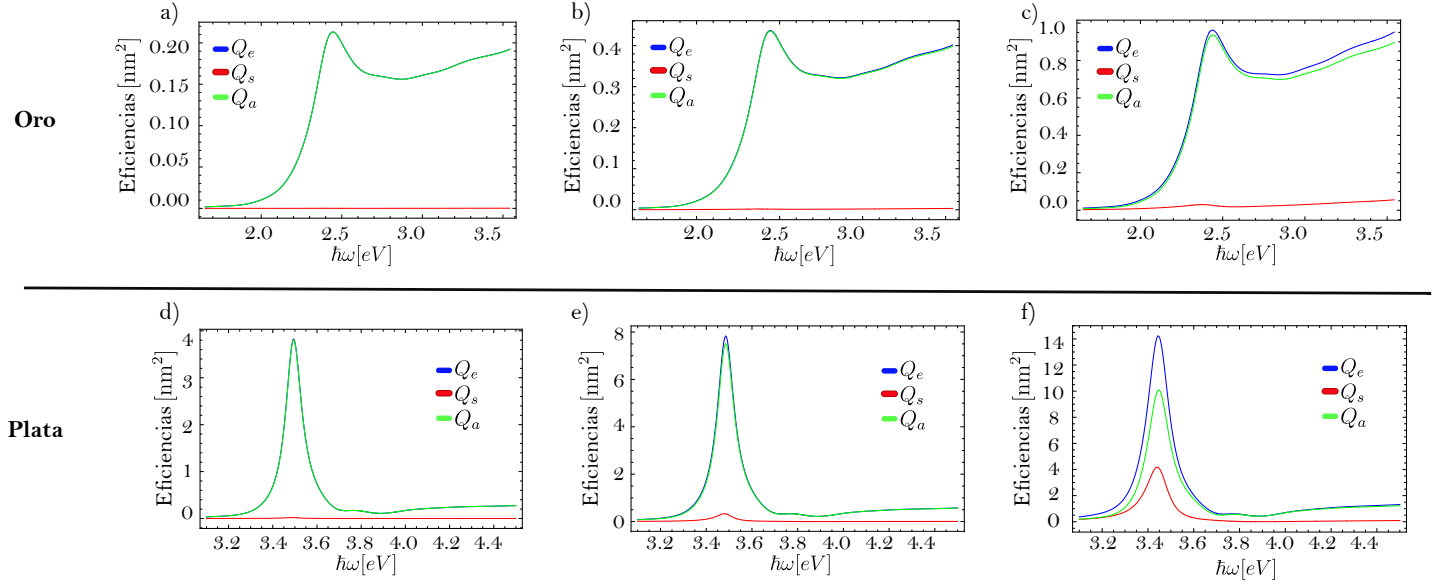


Fig. 4: Eficiencias extinción, absorción y esparcimiento de una NP oro **a)** de 5 nm, **b)** de 10 nm y **c)** de 20 nm y plata **d)** de 5 nm, **e)** de 10 nm, **f)** de 20 nm.

En cuanto a los materiales dieléctricos (silicio y carburo de silicio), en la Fig. 5 se muestra una contribución cercana a cero del esparcimiento para longitudes de onda largas (bajas energías), en un rango de $\hbar\omega \in [2, 3.2]$ eV en las figuras 5a) (radio de 5 nm) y 5b) (radio de 10 nm) para el silicio (renglón superior) y en la figura 5d) (radio de 5 nm) para el carburo de silicio (renglón inferior). Sin embargo, en las figuras 5c) (radio de 20 nm) para el silicio y 5e) (radio de 10 nm) y 5f) (radio de 20 nm) para el carburo de silicio comienza a notarse cierta contribución del esparcimiento. Además, la mayor contribución a la extinción es la absorción (en este caso, la curva verde coincide con la curva azul debido a que el esparcimiento es prácticamente cero) en las figuras 5a) y 5d). El silicio y el carburo de silicio presentan regiones más extendidas respecto a la extinción donde no se puede asegurar que estén atribuidas a un multipolo en específico.

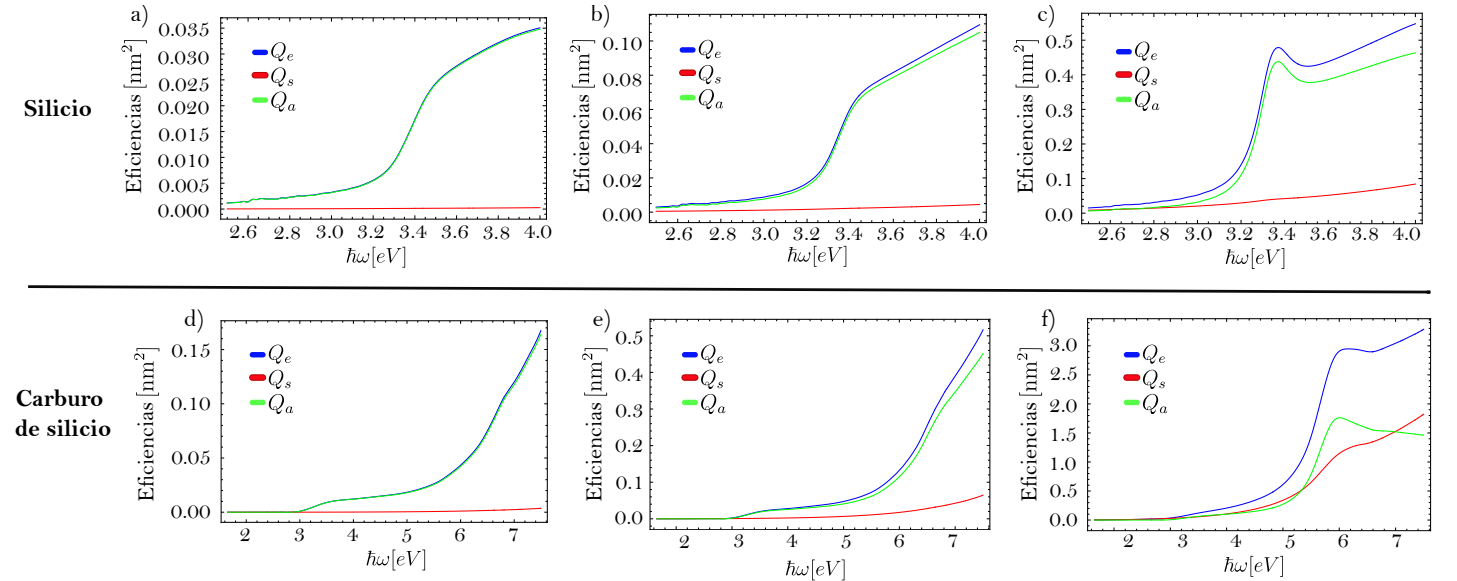


Fig. 5: Eficiencias extinción, absorción y esparcimiento de una NP de silicio **g)** de 5 nm, **h)** de 10 nm y **i)** de 20 nm y carburo de silicio **j)** de 5 nm, **k)** de 10 nm y **l)** de 20 nm.

5. Conclusiones

En este trabajo de servicio social, se estudiaron las eficiencias de extinción, absorción y esparcimiento de una NP esférica empleando la electrodinámica clásica, en particular, la solución de Mie para las ecuaciones de Maxwell. Se consideraron tres tamaños para la NP de: 5, 10 y 20 nm; en cuanto a los materiales, para la parte metálica, se estudiaron aluminio, oro y plata; para la parte dieléctrica, se emplearon silicio y carburo de silicio. En los metales, el esparcimiento es muy pequeño para la NP de 5 nm y con forme el radio de la NP crece a 10 nm y 20 nm se nota un aumento en la absorción; además, es en los metales en los que mejor se distinguen las contribuciones multipolares son aluminio, siendo el dipolo el dominante. En cuanto a los materiales dieléctricos, presentan regiones más extendidas respecto a la extinción donde no se puede asegurar que estén atribuidas a un multipolo en específico. Por otro lado, se nota una contribución cercana a cero del esparcimiento en un rango de $\hbar\omega \in [2, 3.2]$ eV) para las NPs de radio de 5 nm y radio de 10 nm para el silicio y en la NP de radio de 5 nm para el carburo de silicio. Sin embargo, para las NPs radio de 20 nm de silicio y de 10 nm y 20 nm de carburo de silicio, comienza a notarse cierta contribución del esparcimiento. Además, la mayor contribución a la extinción es la absorción para NPs de radio de 5 nm de ambos materiales.

Referencias

- [1] G. Mie. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. En: *Annalen der Physik* 330.0 (1908), 377-445. DOI: [10.1002/andp.19083300302](https://doi.org/10.1002/andp.19083300302).
- [2] J.D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, 1999.
- [3] C.F. Bohren y D.R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 1998.
- [4] G.B. Arfken y H.J. Weber. *Mathematical methods for physicists*. Harcourt Academic Press, 2001.
- [5] U. Kreibig y M. Vollmer. *Optical Properties of Metal Clusters*. Springer, 1995.
- [6] J.J. Quinn. Bulk and surface plasmons in solids. En: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* (1995), 460-464. DOI: [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(95\)00246-4](https://doi.org/10.1016/0168-583X(95)00246-4).
- [7] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, 1976.
- [8] M.I. Marković y A.D. Rakić. Determination of optical properties of aluminium including electron reradiation in the Lorentz-Drude model. En: *Opt. Laser Technol.* 22.6 (1990), 394-398. DOI: [10.1016/0030-3992\(90\)90093-J](https://doi.org/10.1016/0030-3992(90)90093-J).
- [9] W.S.M. Werner, K. Glantschnig y C. Ambrosch-Draxl. Optical constants and inelastic electron-scattering data for 17 elemental metals. En: *J. Phys. Chem. Ref. Data* (2009), 1013-1092. DOI: [10.1063/1.3243762](https://doi.org/10.1063/1.3243762).
- [10] P.B. Johnson y R.W. Christy. Optical constants of the noble metals. En: *Phys. Rev. B* 6 (1972), 4370-4379. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>.
- [11] E.D. Palik. *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press, 1998.