



Localización espectral de resonancias plasmónicas en nanoesferas tipo Drude de tamaño arbitrario

Luna González, Dana L.¹, Urrutia Anguiano, Jonathan A.² y Reyes Coronado, Alejandro³

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México

¹dana.larissalg@ciencias.unam.mx,²jaurrutia.95@ciencias.unam.mx, ³coronado@ciencias.unam.mx



1) Resumen

La **nanoplasmónica** es el estudio de la respuesta electromagnética en sistemas con respuesta metálica a la nanoescala, es decir, con dimensiones menores a 100 nm. En sistemas espacialmente confinados a esta escala, se presenta el fenómeno de **resonancia de plasmón de superficie localizado**, resultado del acoplamiento entre los electrones libres de un metal con el campo electromagnético incidente que ilumina al sistema. Este fenómeno se puede emplear en aplicaciones como la espectroscopía y la medicina, debido a la sintonización de dichas resonancias a una frecuencia específica según las propiedades morfológicas del sistema. En este trabajo, se estudia teórica y numéricamente la localización espectral de las resonancias plasmónicas excitadas en **partículas esféricas** caracterizadas por una función dieléctrica descrita por el **modelo de Drude** en función de su radio.

2) Introducción

La interacción **de la luz con la materia** es un fenómeno que tiene como consecuencia la **absorción** de parte de la luz incidente en la materia y el **esparcimiento** de luz por la materia en todas las direcciones, cuyo efecto combinado resulta en la **extinción** del **rayo incidente** [1].

El problema de esparcimiento de luz dada una partícula de forma, tamaño y propiedades ópticas específicas iluminada por una onda plana monocromática consiste en conocer los campos electromagnéticos en todos los puntos de la partícula y en todos los puntos del medio homogéneo en el que está embebida [1]. Al caso particular de esparcimiento por una partícula esférica, la solución a este problema se le conoce como **teoría de Mie**. Esta es una solución analítica a las ecuaciones de Maxwell que describe la excitación de la **resonancia plasmónica de superficie** para partículas metálicas esféricas iluminadas por una onda electromagnética plana.

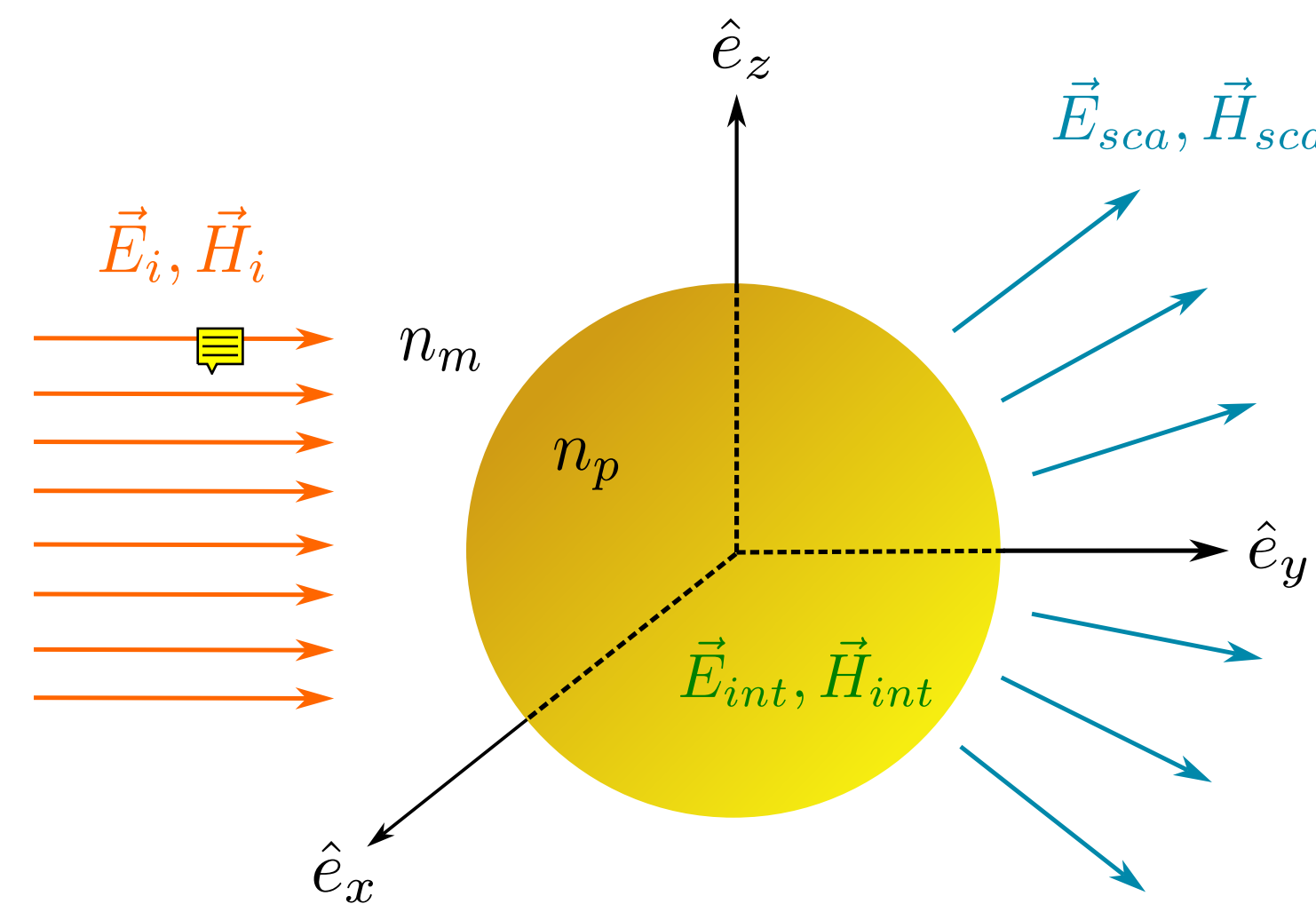


Figura 1: Partícula de índice de refracción n_p inmersa en un medio de índice de refracción n_m . La partícula es iluminada por una onda plana monocromática (\vec{E}_i, \vec{H}_i) que produce campos dentro ($\vec{E}_{int}, \vec{H}_{int}$) y fuera de la partícula ($\vec{E}_{sca}, \vec{H}_{sca}$).

Los campos **EMs** dentro de la partícula y los esparcidos por esta son descritos mediante coeficientes que corresponden a contribuciones multipolares de **modos eléctricos** y **magnéticos** mejor conocidos como **coeficientes de Mie**. En particular, los coeficientes correspondientes al campo esparcido están dados por [1]:

$$a_n = \frac{m\psi_n(mx)\psi'_n(x) - \psi_n(x)\psi'_n(mx)}{m\psi_n(mx)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\psi'_n(mx)},$$

$$b_n = \frac{\psi_n(mx)\psi'_n(x) - m\psi_n(x)\psi'_n(mx)}{\psi_n(mx)\xi'_n(x) - m\xi_n(x)\psi'_n(mx)},$$

con $\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho)$ y $\xi_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho)$ las funciones de Ricatti Bessel, $m = n_p/n_m$ y $x = 2\pi n_m/a$ el parámetro de tamaño.

Mediante estos, puede calcularse la **sección transversal de extinción** dada por [1]:

$$C_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}\{a_n + b_n\}$$

cuyo máximo corresponde a la excitación del plasmón de superficie **localizado**.

En este trabajo se propone emplear el **método de la sección dorada** para determinar numéricamente la posición espectral de las resonancias plasmónicas de los primeros órdenes multipolares eléctricos y **magnéticos**, calculando la sección transversal de extinción para cada uno de ellos, e identificando la frecuencia que maximiza estas cantidades como la resonancia plasmónica de superficie.

2) Materiales plasmónicos

Cuando un material se encuentra en presencia de un campo magnético oscilante, al resolver la ecuación de movimiento que obedecen los electrones libres en el material, se obtiene la **función dieléctrica tipo Drude** [2, 3]

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

donde γ es la constante fenomenológica de amortiguamiento y ω_p la frecuencia de plasma.

A partir de las ecuaciones de los coeficientes de Mie, se observa que, para un multipolo fijo, la contribución de los campos EMs en la sección transversal de extinción se maximiza cuando el denominador de los coeficientes de Mie es mínimo [2]. Al considerar el **límite de partícula pequeña** ($x = k_m a \ll 1$) para esferas inmersas en vacío ($n_m = 1$), se obtiene que los **modos normales eléctricos** y **magnéticos** cumplen las relaciones

$$\epsilon_p(\omega_l) = -\frac{l+1}{l},$$

$$l = l-1,$$

respectivamente, donde se puede observar que no existe una solución para los modos normales magnéticos para ninguna l . Al emplear la función dieléctrica tipo Drude y considerar el límite $\gamma \rightarrow 0$, al despejar ω se obtiene la expresión para la frecuencia de resonancia del modo normal eléctrico del multipolo l dada por

$$\frac{\omega_l}{\omega_p} = \sqrt{\frac{l}{2l+1}}.$$

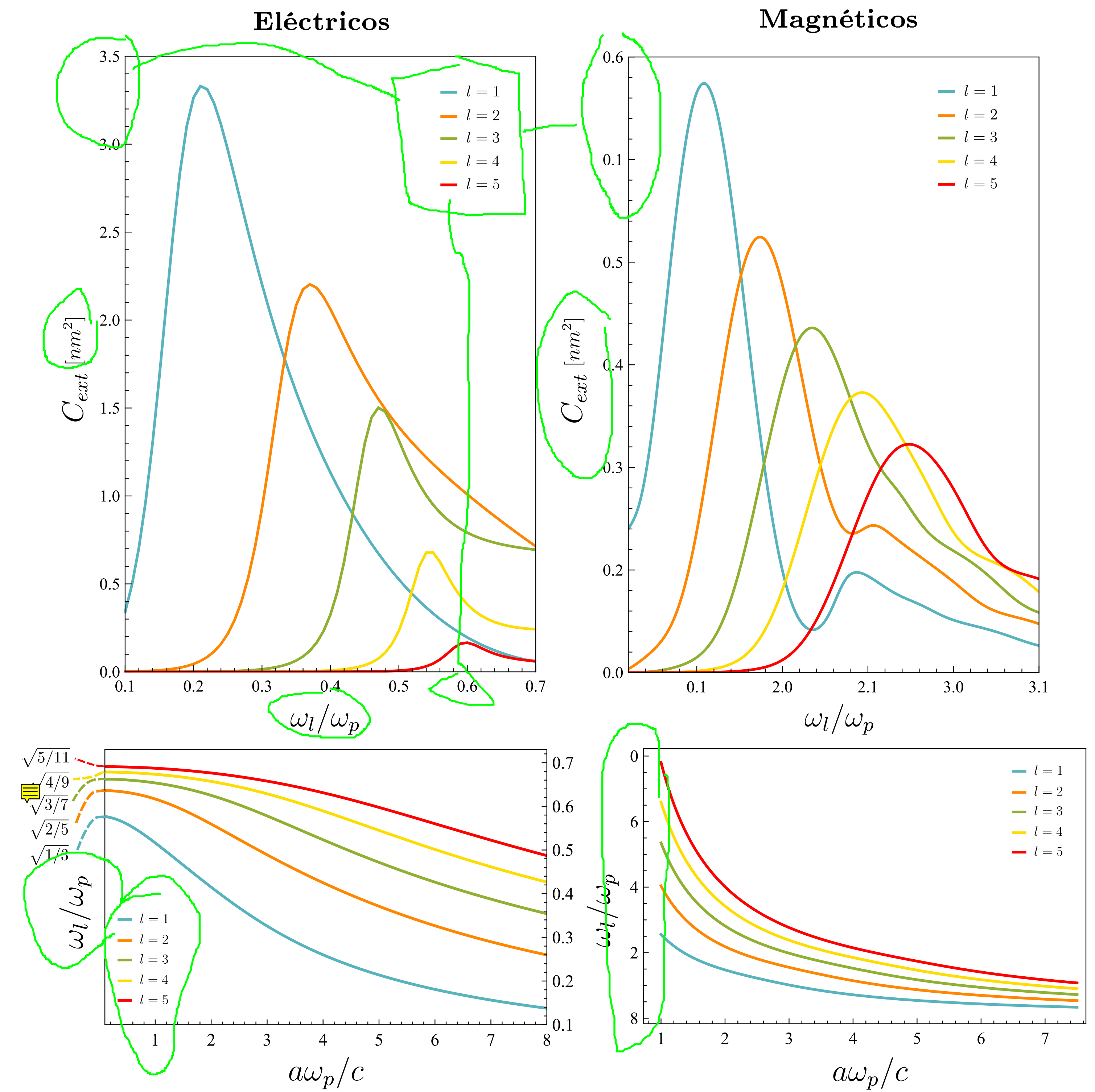
4) Resultados

Las resonancias de los materiales plasmónicos dependen del parámetro adimensional $\tilde{a} = \omega_p a/c$, que compara la frecuencia de excitación ω con el tiempo de acoplamiento $\tilde{a}c^{-1}$ entre la interacción EM de la esfera y la densidad de carga inducida que corresponde al plasmón de superficie [4]. Por ello, se reescribieron los coeficientes de Mie, en términos de esta interacción, considerando las siguientes definiciones

$$n_p = \sqrt{1 - \frac{1}{\tilde{\omega}(\tilde{\omega} + i\tilde{\gamma})}}, \quad x = \tilde{\omega}\tilde{a}n_m.$$

En las siguientes figuras se muestran las contribuciones individuales de las secciones transversales de extinción de los multipolos $l = 1, 2, 3, 4, 5$ eléctricos y magnéticos, en términos del parámetro $\tilde{\omega}$ y $\tilde{\gamma}$, donde se consideró $\tilde{a} = 5$, $n_m = 1$, $\tilde{\gamma} = \gamma/\omega_p \approx 10^{-2}$.

Además, se muestran las frecuencias de resonancia ω_l normalizadas respecto a la frecuencia de plasma ω_p , como función del parámetro adimensional $\omega_p a/c$ para los multipolos $l = 1, 2, 3, 4$ y 5.



5) Conclusiones

- La banda de frecuencias en la que las frecuencias de resonancia de los modos eléctricos se espera que se encuentren es $[\omega_p/\sqrt{3}, \omega_p/\sqrt{2}]$, cuyos límites corresponden al modo plasmónico dipolar eléctrico y a la resonancia plasmónica de superficie de una esfera de radio infinito, es decir, a un plano infinito.
- Conforme el límite de partícula pequeña deja de ser válido se presenta un corrimiento al rojo de las resonancias plasmónicas de superficie localizadas de los modos eléctricos y magnéticos para partículas esféricas.
- No es posible calcular una aproximación de las frecuencias de resonancia de los modos normales magnéticos en el límite de partícula pequeña.

6) Referencias

- C.F. Bohren y D.R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles* (John Wiley & Sons, 1980).
- L. Novotny, *Principles of Nano-Optics* (Cambridge University Press, New York, 2006).
- N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics, Principles of Nano-Optics* (Saunders College, 1976).
- J. Aizpurua, *Coupling of electrons and electromagnetic surface modes in scanning transmission electron microscopy* (Tesis doctoral, Universidad de País Vasco, País Vasco, España, 1998).