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, Alejandro[3]

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

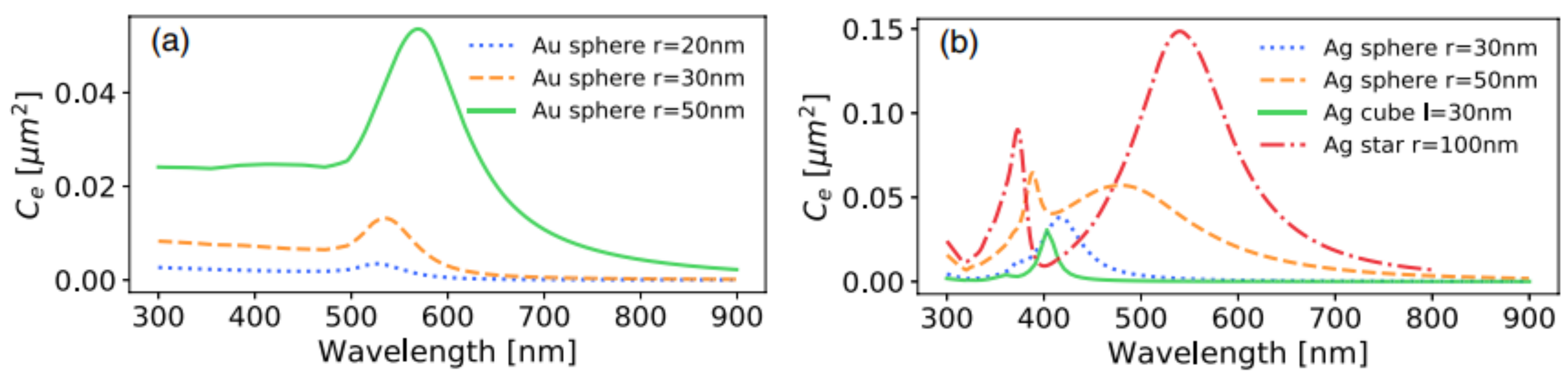
[1]dana.larissalg@ciencias.unam.mx, [2]jaurrutia.95@ciencias.unam.mx, [3]coronado@ciencias.unam.mx

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.

1) Introducción

La interacción luz-materia puede estudiarse clásicamente mediante 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 haz incidente [1]. En los últimos años, en muchos campos de la ciencia aplicada y la tecnología, se han estudiado las propiedades ópticas de partículas de diferentes formas y tamaños; en particular, se ha estudiado la dependencia de la sección transversal de extinción del tamaño de las partículas esféricas para describir muestras coloidales. [2]



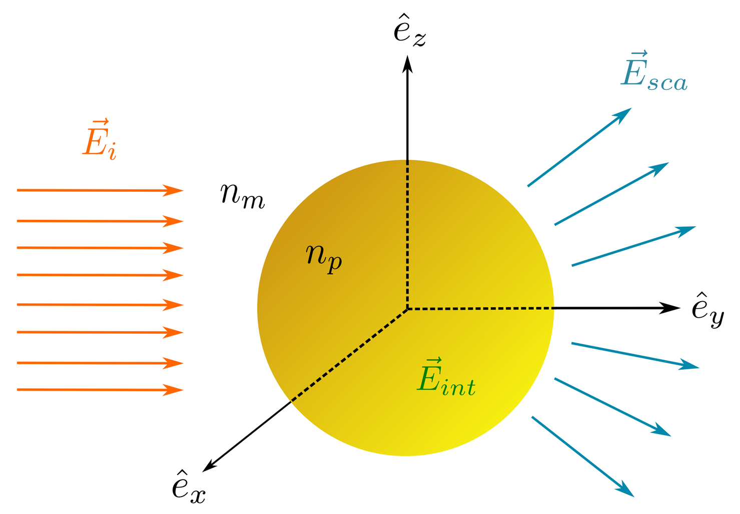
Secciones transversales de extinción de nanopartículas de a) oro y b) plata de diferentes formas y tamaños. Tomada de [2]

2) Teoría de Mie

La solución al problema de esparcimiento dada una partícula esférica se 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 (EM) plana. 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.

La **sección transversal de extinción** se escribe en términos de los coeficientes de Mie como [1]:

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

cuyo máximo corresponde a la excitación del plasmón de superficie localizado obtenido cuando el denominador de los coeficientes de Mie es mínimo [3].

2) Materiales plasmónicos cuando $x \ll 1$

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** [3, 4]

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

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

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** cumplen las relaciones

Eléctricos

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

Magnéticos

$$l \stackrel{!}{=} -(l+1),$$

Al emplear la Ec.1 y considerar el límite $\gamma \to 0$, al despejar ω se obtiene

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

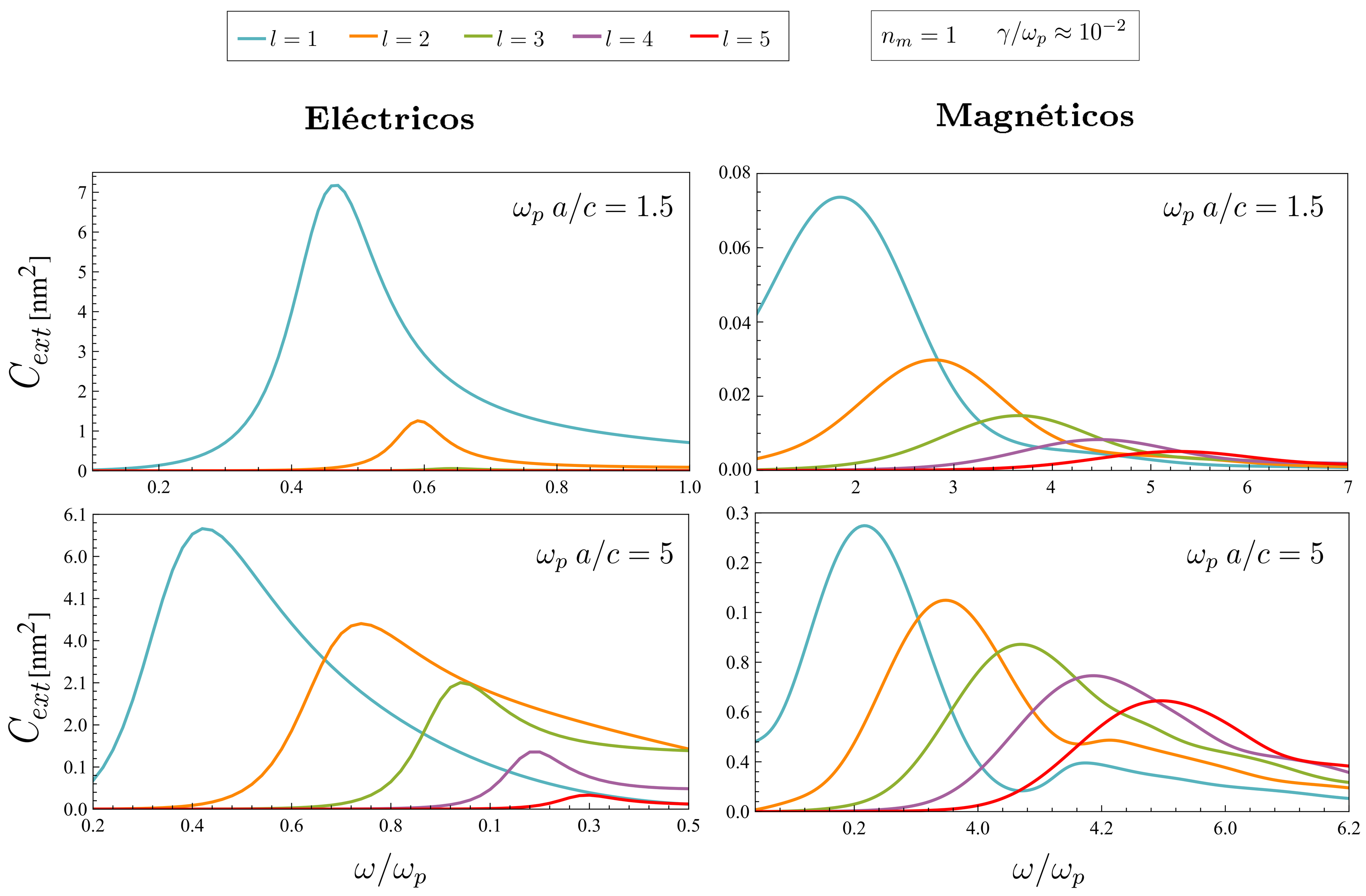
- Para $l = 1$, $\omega_p/\sqrt{3}$
- Para $\ell \to \infty$, $\omega_p/\sqrt{2}$

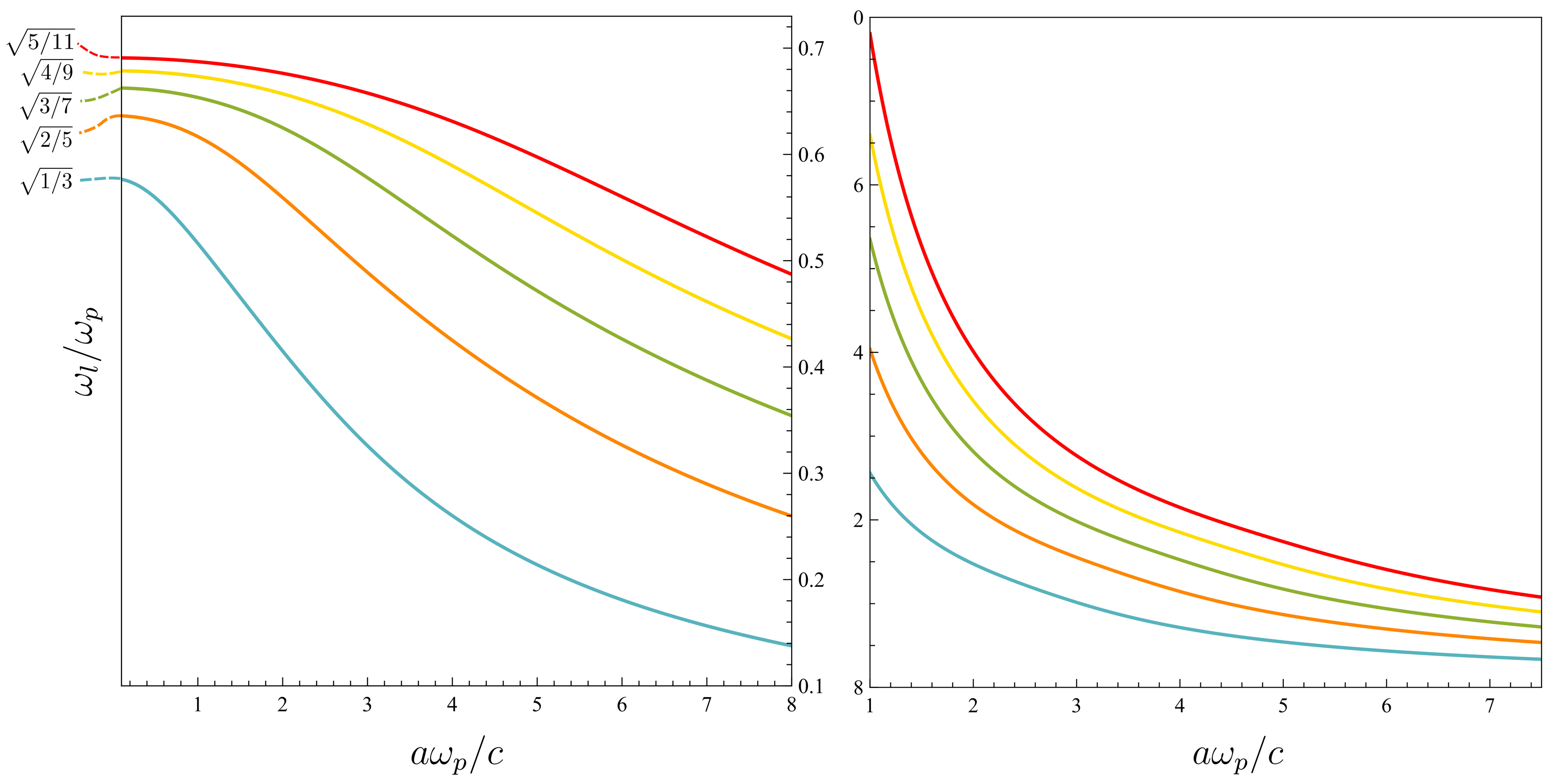
4) Resultados numéricos

Dado que para partículas de mayor radio, las resonancias deben de calcularse de forma numérica, se empleó el método de la sección dorada [pones referencia]. Se reescribieron n_p y x en términos de variables adimensionales

$$n_p = \sqrt{1 - \frac{1}{\frac{\omega}{\omega_p}\left(\frac{\omega}{\omega_p} + i\frac{\gamma}{\omega_p}\right)}}, \qquad x = \frac{\gamma}{\omega_p}\frac{\omega_p a}{c}n_m.$$

donde $\omega_p a/c$ compara la frecuencia de excitación ω con el tiempo de acoplamiento ac^{-1} entre la interacción EM de la esfera y la densidad de carga inducida que corresponde al plasmón de superficie [5].





5) Conclusiones

- La banda de frecuencias en la que las frecuencias de resonancia de los modos eléctricos se espera que se encuentren es $[\omega_p/\sqrt{3}, \omega_p/\sqrt{2}]$.
- 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

[1] C.F. Bohren y D.R. Huffman , *Absorption and scattering of light by small particles* (John Wiley & Sons, 1980).

[2] E. R. Méndez et al., *Particle size distribution from extinction and absorption data of metallic nanoparticles* (Appl. Opt. 58, 9955-9966, 2019).

[3] L. Novotny, *Principles of Nano-Optics* (Cambridge University Press, New York, 2006).

[4] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics*, *Principles of Nano-Optics* (Saunders College, 1976).

[5] J. Aizpurua, *Coupling of electrons and electromagnetic surface modes in scanning transmission electron microscopy* (Tesis doctoral, Universidad de País Vasco, País Vasco, España, 1998).

Agradecimientos al proyecto PAPIIT-UNAM IN107122 y a la Facultad de Ciencias de la UNAM