



Resonancias plasmónicas dipolares en nanoelipsoides: análisis de contribuciones interbanda e intrabanda en el régimen cuasiestático

Luna González, D. Larissa¹, Urrutia Anguiano, Jonathan A.² y Reyes Coronado, Alejandro³

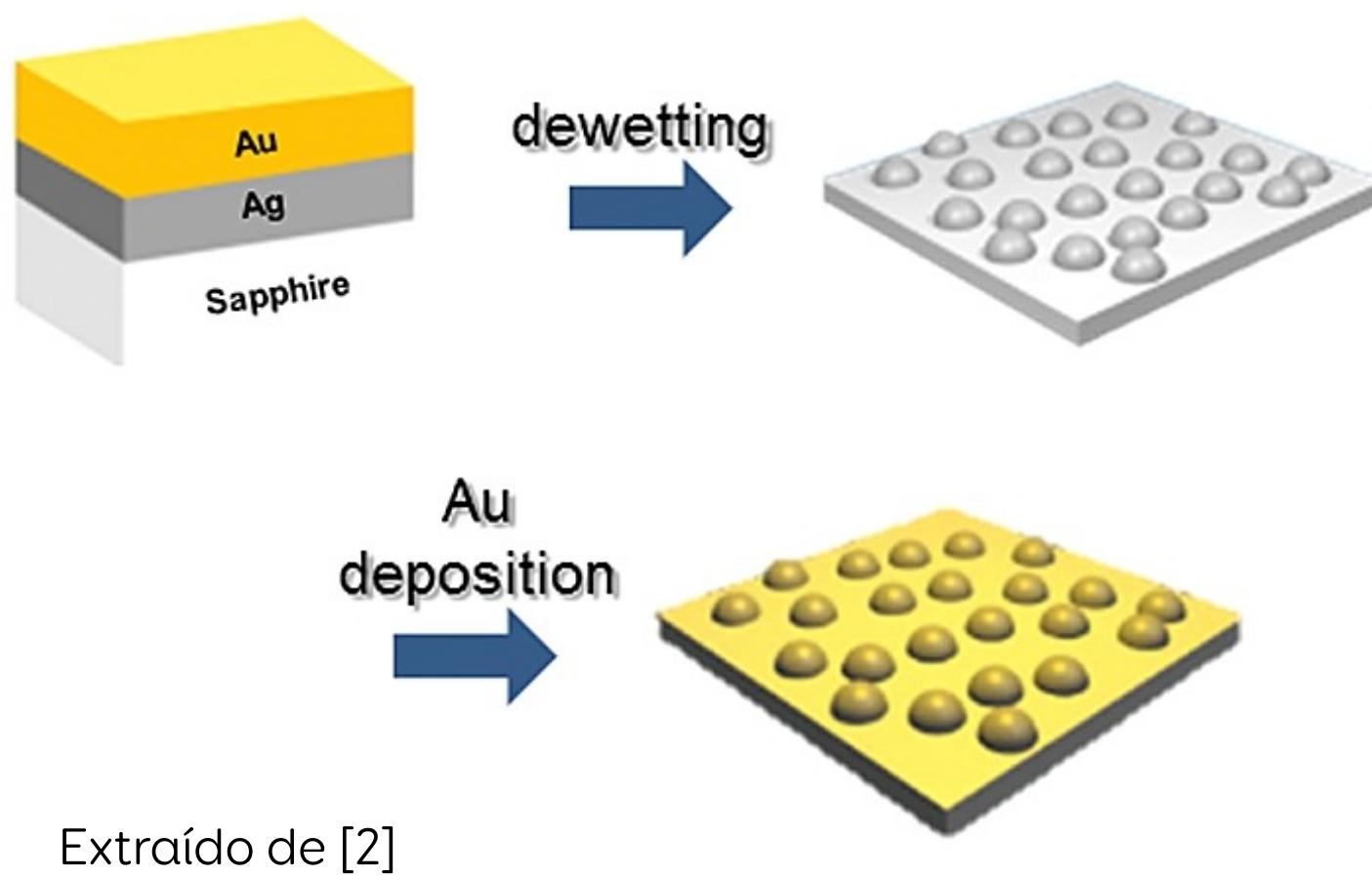
Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México

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

Resumen

Las **resonancias plasmónicas** han cobrado un gran interés en áreas como la óptica, la magnetoóptica y la fotónica, debido a sus potenciales aplicaciones en biodetección, telecomunicaciones y microscopía. En el caso particular de **nanoelipsoides** iluminados en el espectro visible, las resonancias plasmónicas dipolares se pueden distinguir de otro tipo de excitaciones al resolver analíticamente el problema del esparcimiento y la absorción de luz en el **régimen cuasiestático**. La distinción entre el origen de las posibles resonancias se realiza al emplear una formulación de la función dieléctrica que separa las contribuciones electrónicas **intrabanda** e **interbanda** del material que conforma al nanoelipsoide. En este trabajo, se estudia teóricamente la respuesta plasmónica de nanoelipsoides de materiales reales en la aproximación cuasiestática mediante la solución analítica de la ecuación de Laplace en coordenadas elipsoidales confocales. Se emplean modelos reportados en la literatura ajustados a datos experimentales de la **función dieléctrica** para distintos materiales con el fin de identificar los dos tipos de contribuciones, y se incorporan **correcciones por tamaño**, relevantes en la nanoescala. A partir del cálculo de la sección transversal de extinción y la comparación con el caso límite de una nanoesfera, se identifican las frecuencias de excitación de la resonancia plasmónica dipolar y sus corrimientos espectrales en función de parámetros geométricos del nanoelipsoide. Asimismo, se discute el efecto de las contribuciones intrabanda en la función dieléctrica sobre la resonancia plasmónica dipolar excitada en el nanoelipsoide. Los resultados permiten identificar si las resonancias encontradas tienen un origen plasmónico.

1. Fabricación de metasuperficies



Extraido de [2]

La deshumectación térmica de películas ultrafinas de oro es un método de fabricación de **metasuperficies** que ofrece una alternativa económica y escalable frente a otras técnicas convencionales, aunque genera nanoislas de **geometría irregular** [1]. Estas irregularidades pueden describirse de manera **aproximada** mediante **elipsoides**, lo que motiva su estudio como un modelo realista para analizar las propiedades plasmónicas.

2. Elipsoides en la aproximación cuasiestática

El problema de esparcimiento de luz por una partícula elipsoidal arbitraria en la **aproximación cuasiestática** consiste en resolver la **ecuación de Laplace** para un elipsoide de dimensiones tales que $\lambda \gg a \geq b \geq c$ [3]. De tal forma que se obtienen **tres resonancias plasmónicas dipolares** en términos de las polarizabilidades [3]

$$\alpha_j = V \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_m + L_j(\epsilon_p - \epsilon_m)}$$

donde j denota cada uno de los semiejes y L_j son los **factores geométricos** determinados por la excentricidad del elipsoide.

En muestras reales con partículas orientadas aleatoriamente, la respuesta óptica se obtiene como un **promedio** de la excitación a lo largo de los tres semiejes del elipsoide, es decir [3]

$$\langle C_{\text{abs}} \rangle = \frac{k}{3} \text{Im}\{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3\} \quad \langle C_{\text{sca}} \rangle = \frac{k^4}{3(6\pi)} (|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\alpha_3|^2)$$

$$\langle C_{\text{ext}} \rangle = \langle C_{\text{abs}} \rangle + \langle C_{\text{sca}} \rangle$$

3. Modelado del material

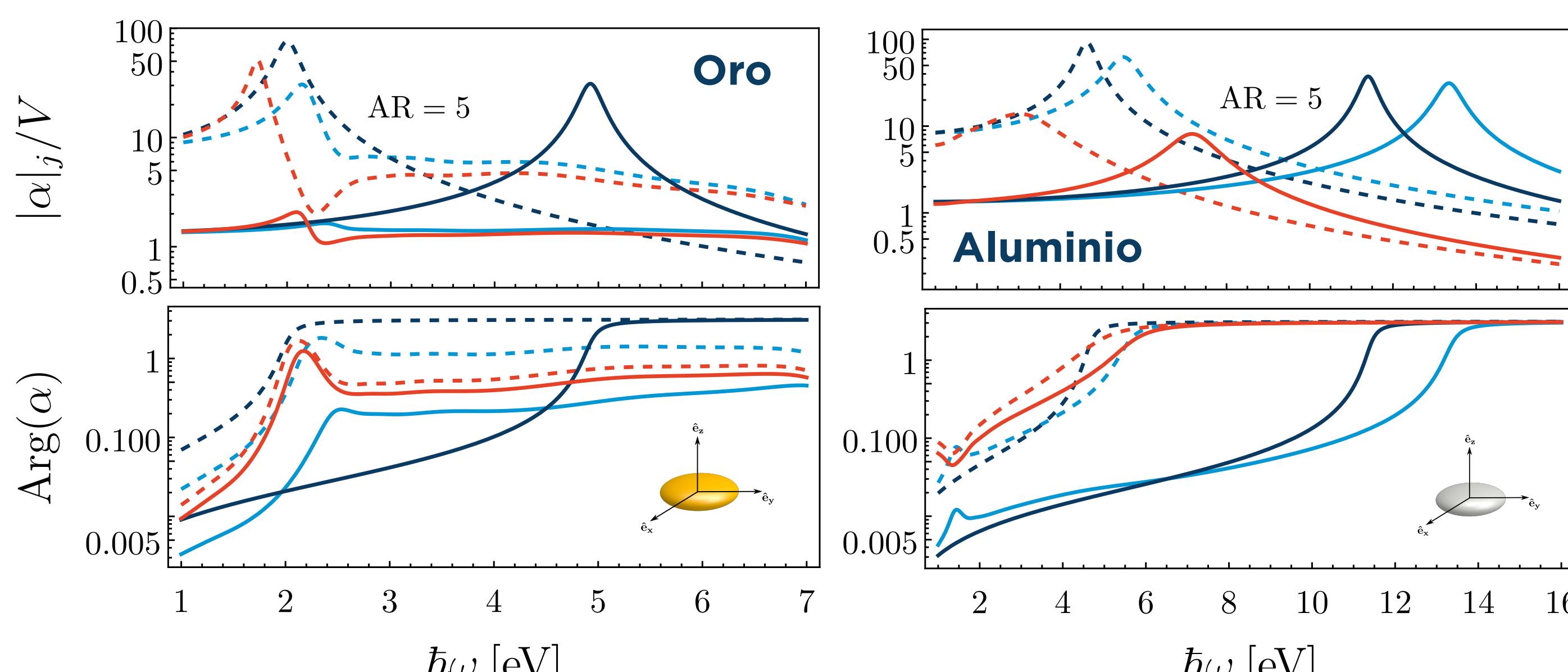
La función dieléctrica incluye contribuciones **intrabanda** (electrones libres) e **interbanda** [4]. En nanopartículas cuyo tamaño es comparable con el **camino libre medio** de los electrones, los electrones interactúan con la superficie, por lo que es necesario incluir una corrección γ_{eff} a la contribución interbanda, que dependa de la **geometría** y del **tamaño** de la nanopartícula [4]

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\text{inter}} + \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_{\text{eff}})} \right) \epsilon_{\text{intra}}$$

ω_p : Frecuencia de plasma
 γ_0 : Constante fenomenológica de amortiguamiento
 γ_{eff} : Corrección por tamaño
 v_F : Velocidad de Fermi
 A : Parámetro fenomenológico

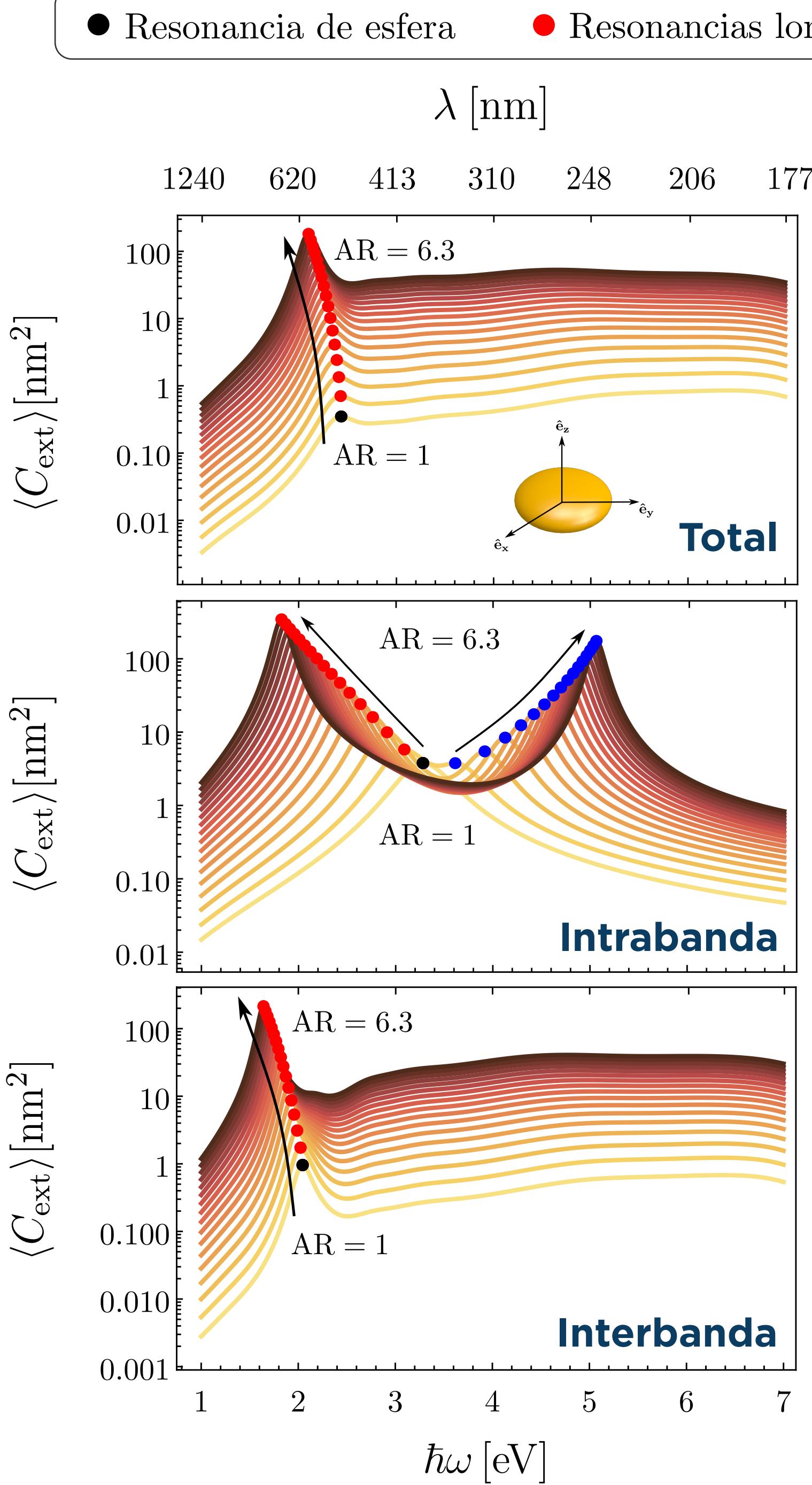
donde $\gamma_{\text{eff}} = \gamma_0 + A \frac{v_F}{L}$, que para elipsoides es $L = \sqrt[3]{abc}$ [5].

— Total — Intrabanda — Interbanda
 — Transversal — Longitudinal

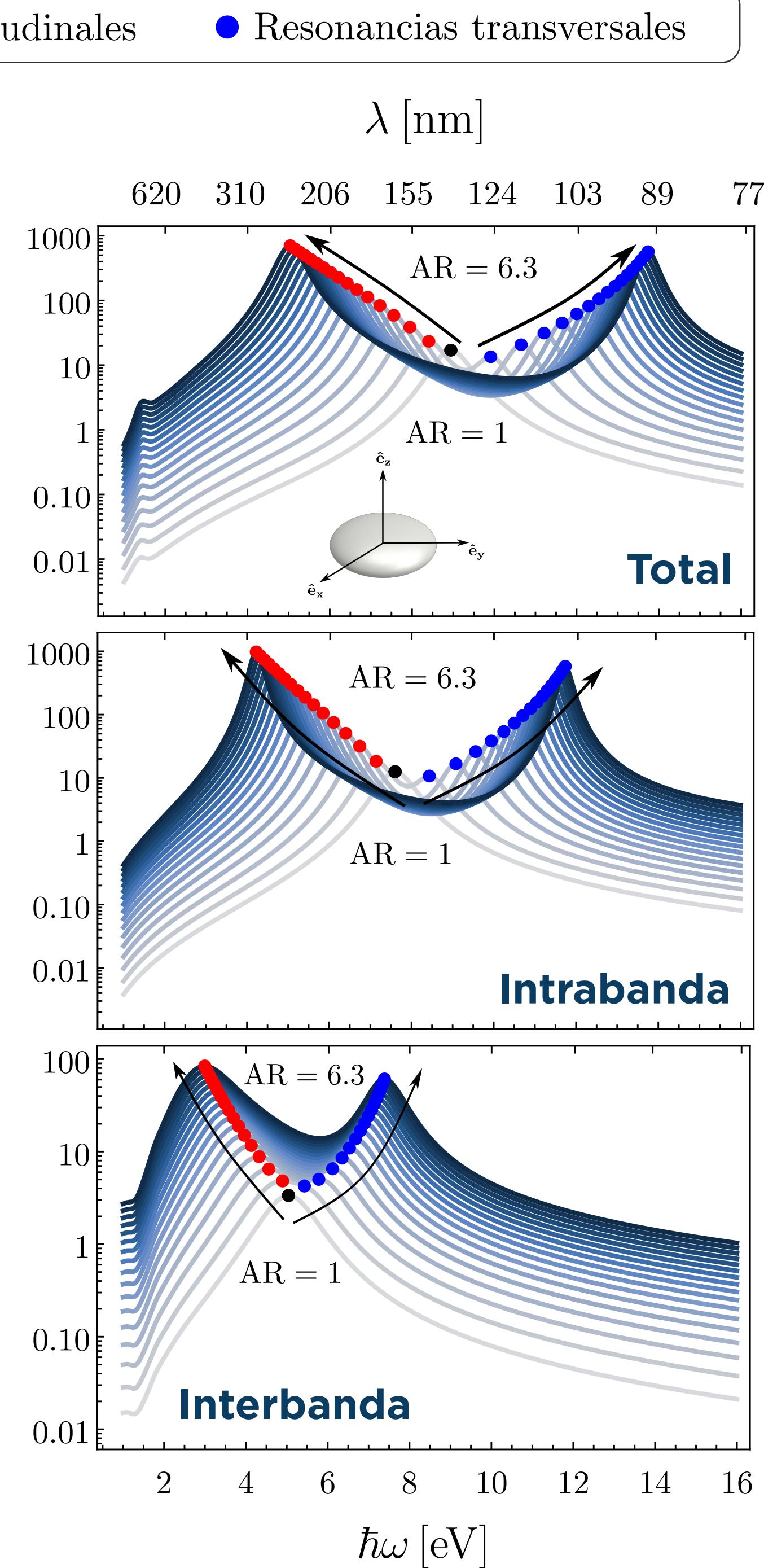


4. Resultados

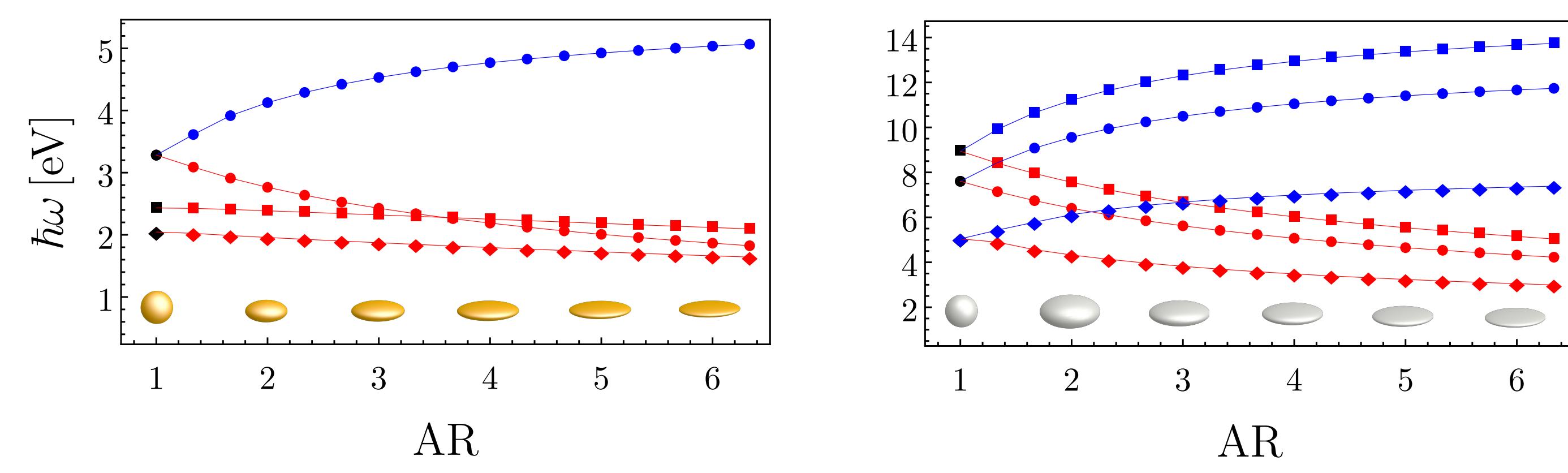
Oro



Aluminio



■ Total ■ Intrabanda ■ Interbanda



5. Conclusiones

- En el aluminio al incorporar los efectos de las transiciones intrabanda hay un corrimiento al azul de las resonancias longitudinales y transversales.
- En el caso del oro, sólo es posible distinguir las resonancias transversales al considerar únicamente efectos intrabanda.
- En el caso del oro, al incorporar los efectos de las transiciones interbanda el corrimiento al azul de las resonancias longitudinales se observa a partir de AR=3.6. Para AR menores se observa un corrimiento hacia el rojo.
- En ambos materiales conforme aumenta AR aumenta el corrimiento hacia el rojo y el azul de las resonancias longitudinales y transversales, respectivamente

6. Referencias

- [1] J. P. Cuanalo, et al. *Óptica Pura y Aplicada*, 58(1), 2025
- [2] N. Gazit, et al. *Acta Materialia*, 129, 2017
- [3] C. F. Bohren y D. R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. 2008
- [4] C. Noguez. *Journal Physics of Chemistry C*, 111(10), 2007
- [5] N. M. Figueiredo, et al. *Plasmonics*, 15(2), 2020
- [6] D. Espinosa. Tesis de licenciatura (Universidad Nacional Autónoma de México, México, 2022)