



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

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

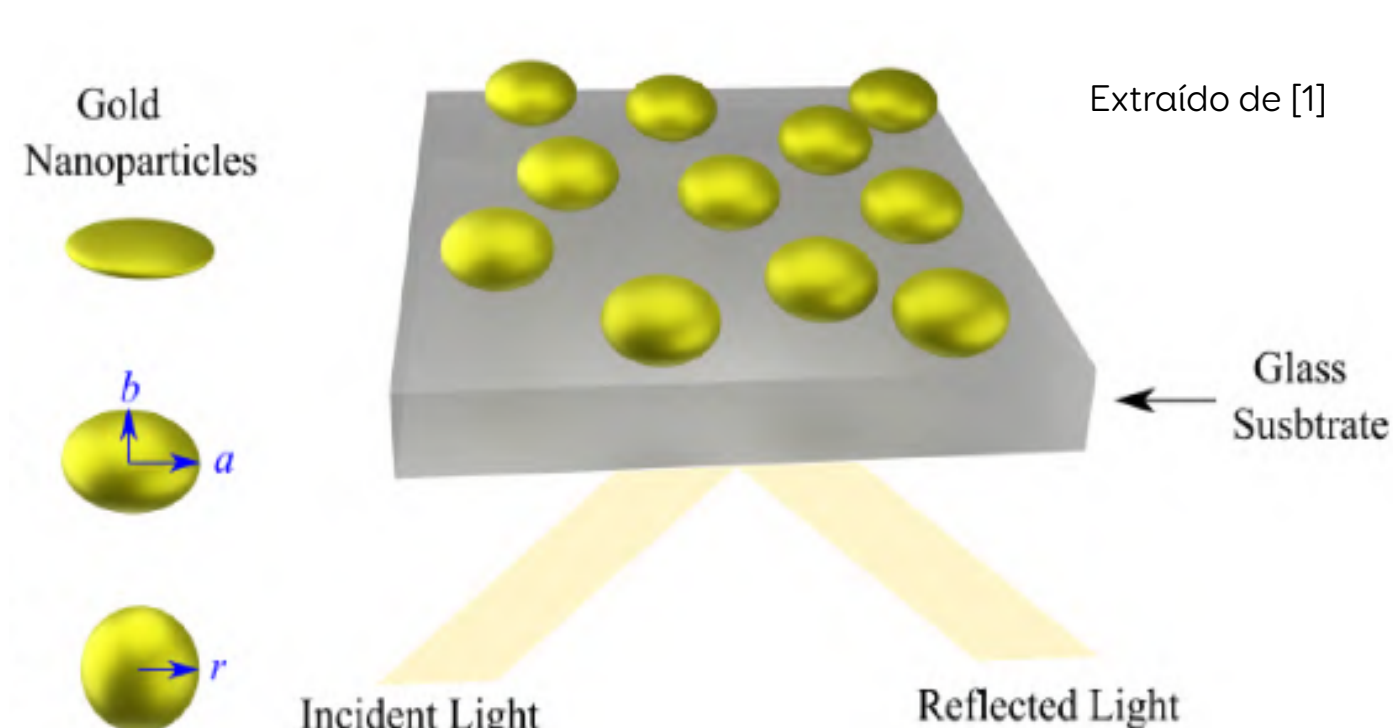
Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México

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

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 esparramiento 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. Introducción



En la síntesis de metasuperficies, los procesos de nucleación producen nanoislas con formas irregulares que pueden aproximarse mediante **elipsoides** [1]. De forma análoga, muchas partículas biológicas y naturales presentan geometrías no esféricas, por lo que los elipsoides constituyen un modelo más realista para describir sus propiedades ópticas [2].

2. Esparramiento por elipsoides

Los nanoelipsoides metálicos poseen **tres resonancias plasmónicas** que corresponden a la oscilación de los electrones a lo largo de los tres ejes de la nanopartícula. Cuando estas NPs se encuentran **orientadas aleatoriamente**, se produce un espectro de **extinción promedio** que contiene las tres resonancias plasmónicas [3].

Al resolver la **ecuación de Laplace** en **coordenadas elipsoidales confocales**, se obtiene que la **polarizabilidad** en cada uno de los ejes del elipsoide está dada por [4]

$$\alpha_j = V \frac{\epsilon_{\text{int}} - \epsilon_{\text{ext}}}{\epsilon_m + L_j(\epsilon_{\text{int}} - \epsilon_{\text{ext}})}$$

donde j denota cada uno de los semiejes y L_j son los factores geométricos determinados por la excentricidad del elipsoide [4].

De esta forma, se obtienen las secciones transversales, que para partículas orientadas aleatoriamente son [4]

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

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

3. Función dieléctrica

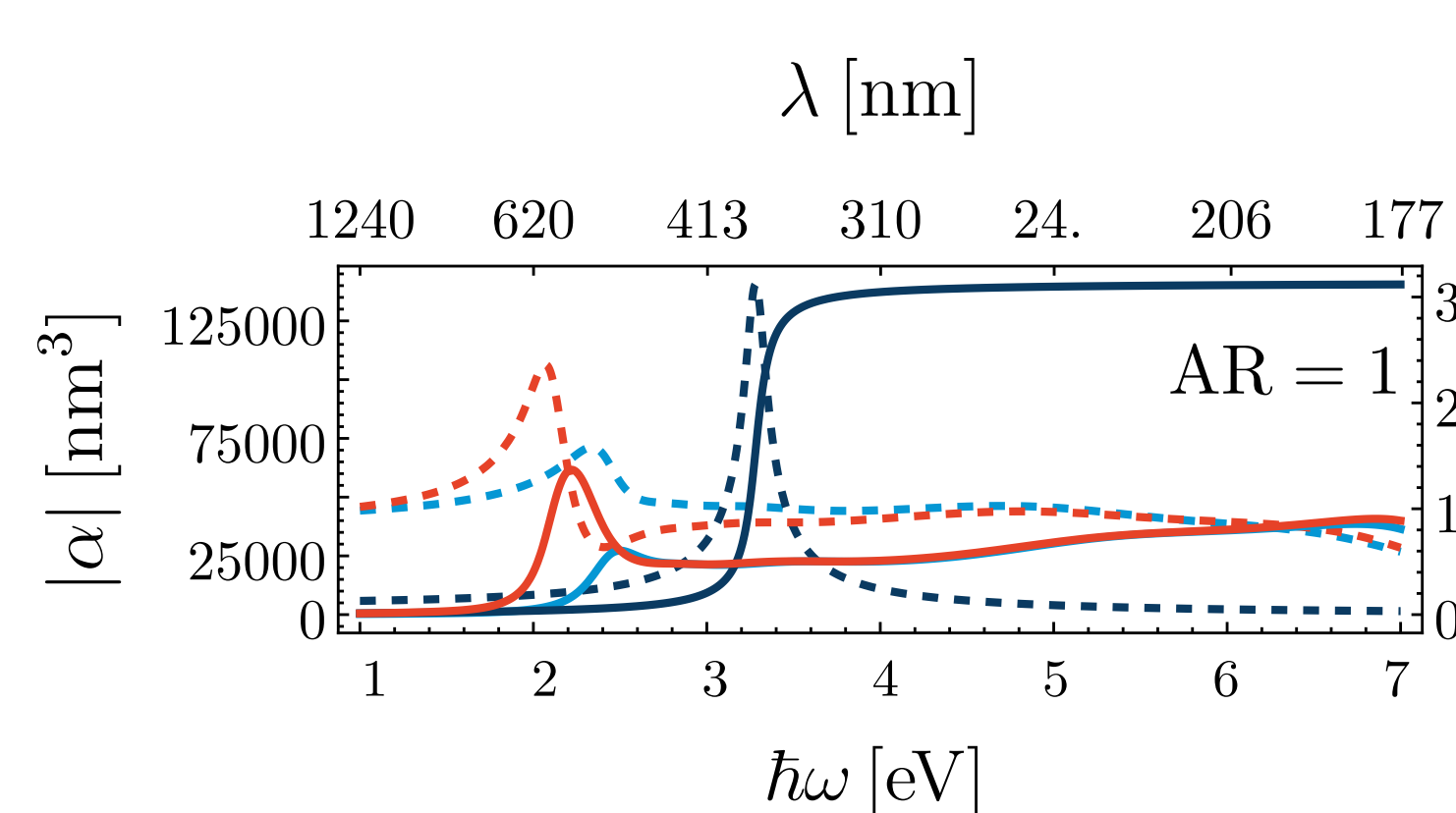
La función dieléctrica se compone de transiciones **intrabanda** (electrones libres) e **interbanda** [2]. En nanopartículas de dimensiones comparables al **camino libre medio** de los electrones, estos se dispersan en la superficie, introduciendo un término de corrección γ_{eff} que depende de la **geometría** y del **tamaño** de la nanopartícula [3].

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\text{inter}} + \underbrace{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_0 + i\gamma_{\text{eff}})}\right)}_{\epsilon_{\text{intra}}}$$

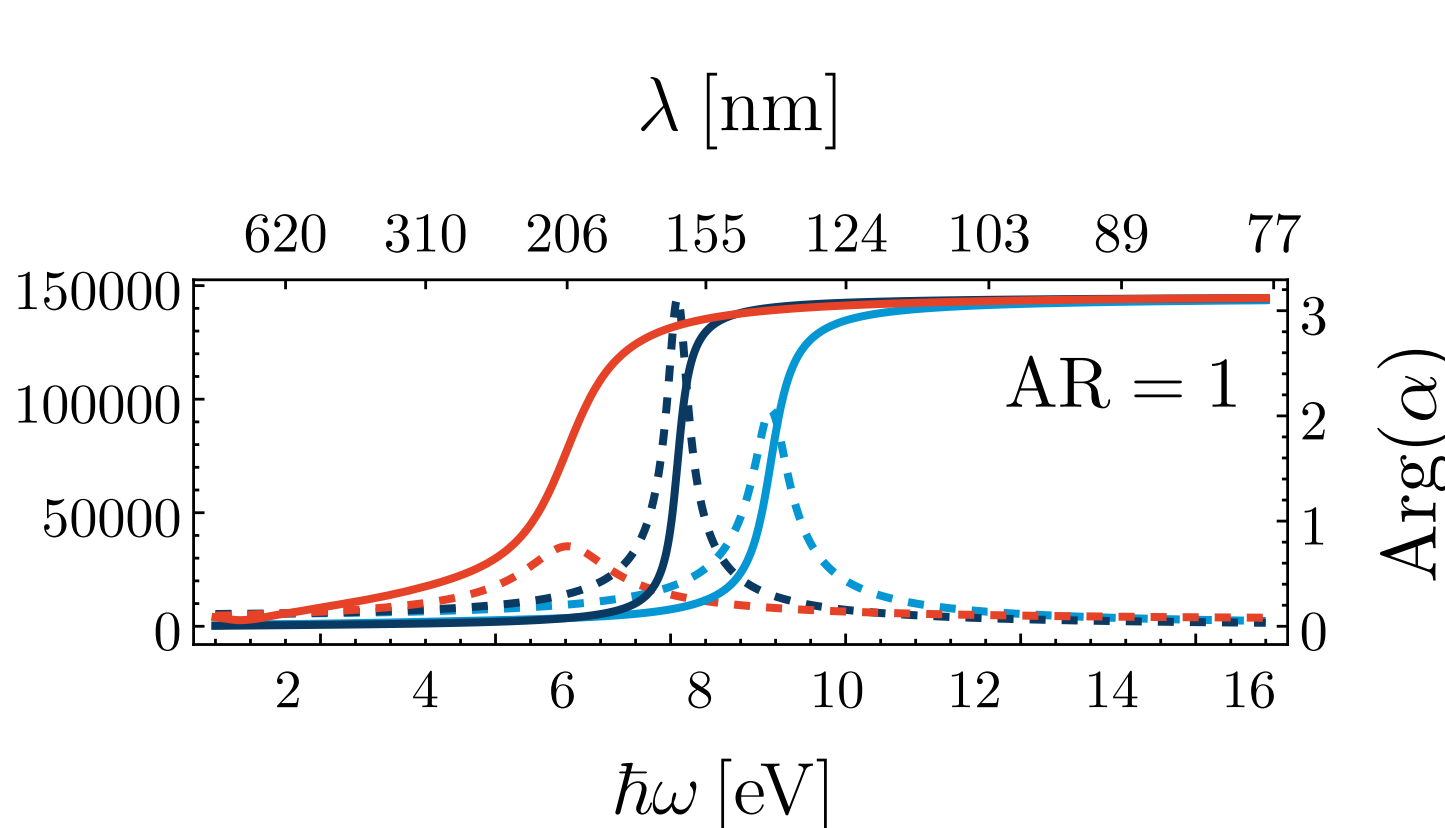
ω_p : Frecuencia de plasma
 γ_0 : Constante fenomenológica de amortiguamiento
 γ_{eff} : Corrección por tamaño

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

Oro



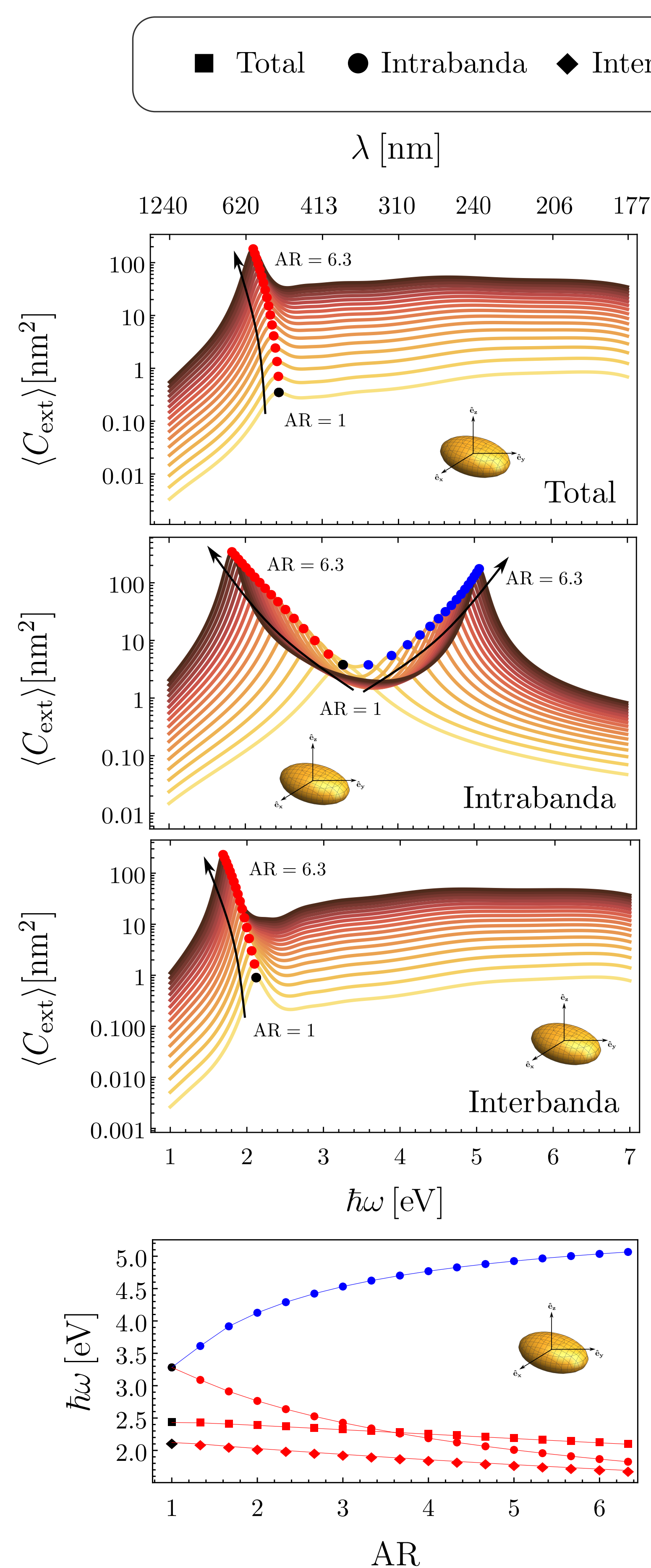
Aluminio



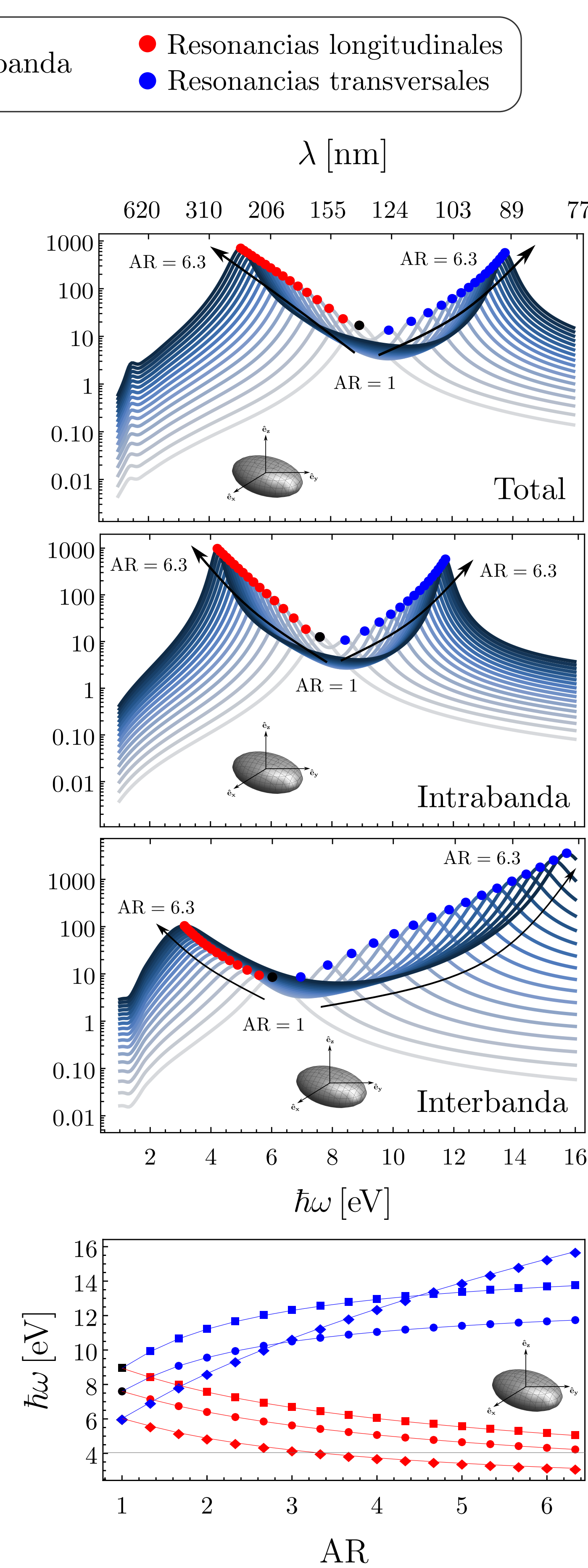
— Total — Intrabanda - - Interbanda

4. Resultados

Oro



Aluminio



5. Conclusiones

- En el aluminio al incorporar los efectos de las transiciones interbanda 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, 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., Optimizing Plasmonic Coupling in Gold Nanoparticle Metasurfaces: A Theoretical Investigation. Óptica Pura y Aplicada, 58(1), 2025
- [2]
- [3] C. Noguez, Surface Plasmons on Metal Nanoparticles: The Influence of Shape and Physical Environment. J. Phys. Chem. C, 111(10), 2007
- [4] C. F. Bohren y D. R. Huffman, Absorption and scattering of light by small particles. 2008
- [5]
- [6] D. Espinosa, Ajuste causal de datos experimentales para la función dieléctrica de distintos materiales. Tesis de licenciatura (Universidad Nacional Autónoma de México, México, 2022)