



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

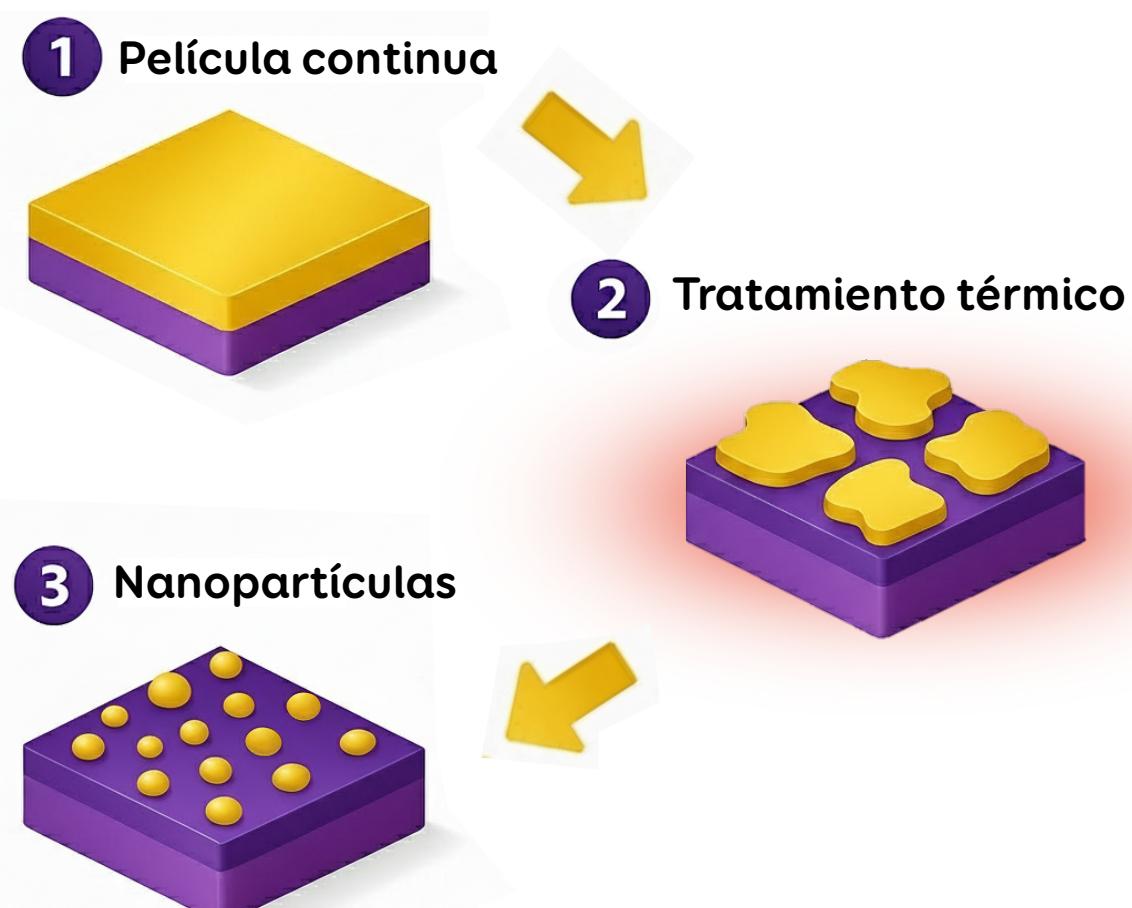
Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México

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 espaciamiento 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



El método *dewetting* es una técnica de fabricación de **metasuperficies** a partir de películas delgadas 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

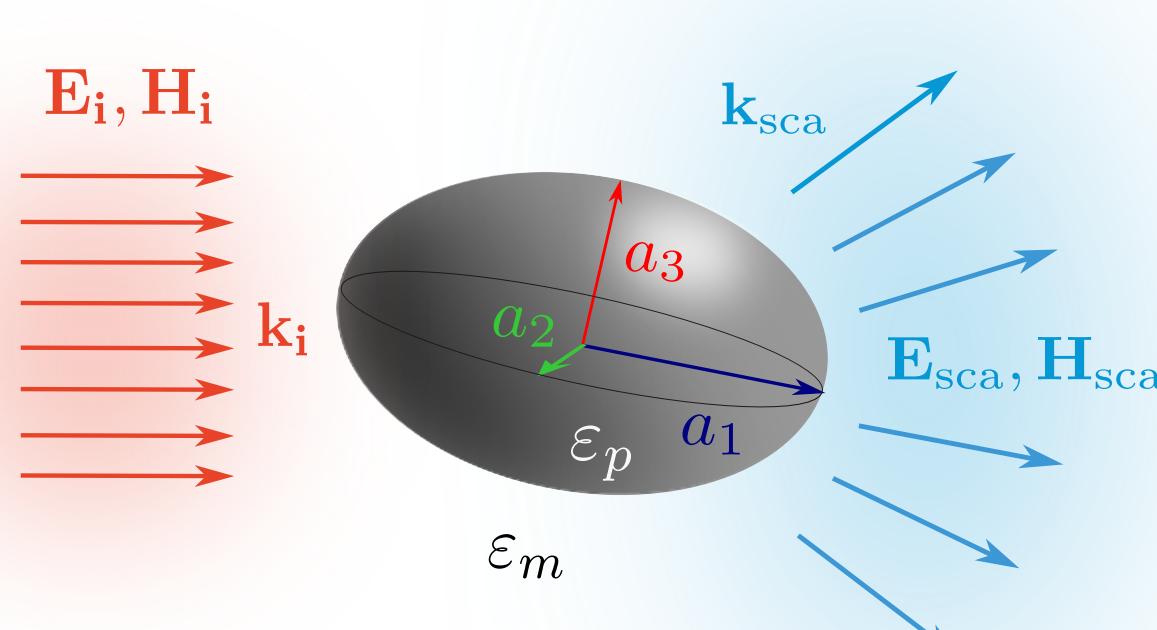
El problema de espaciamiento de luz por una partícula elipsoidal arbitraria en la **aproximación cuasiestática** consiste en resolver la **ecuación de Laplace** para un elipsoide con una función dieléctrica ε_p , embebido en un medio caracterizado por una función dieléctrica ε_m . La aproximación cuasiestática es válida para un elipsoide con semiejes a_j (con $j = 1, 2, 3$) y razón de aspecto $AR = a_1/a_3$, que se ilumina con una onda plana E_i con una longitud de onda λ tal que $\lambda \gg a_1 \geq a_2 \geq a_3$. En este régimen, se obtienen **tres resonancias plasmónicas dipolares**, determinadas por las polarizabilidades α_j y el volumen V del elipsoide [2]

$$\alpha_j = V \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_m + L_j(\varepsilon_p - \varepsilon_m)},$$

donde L_j son los **fatores 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 lo largo de los tres semiejes del elipsoide, es decir [2]

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

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



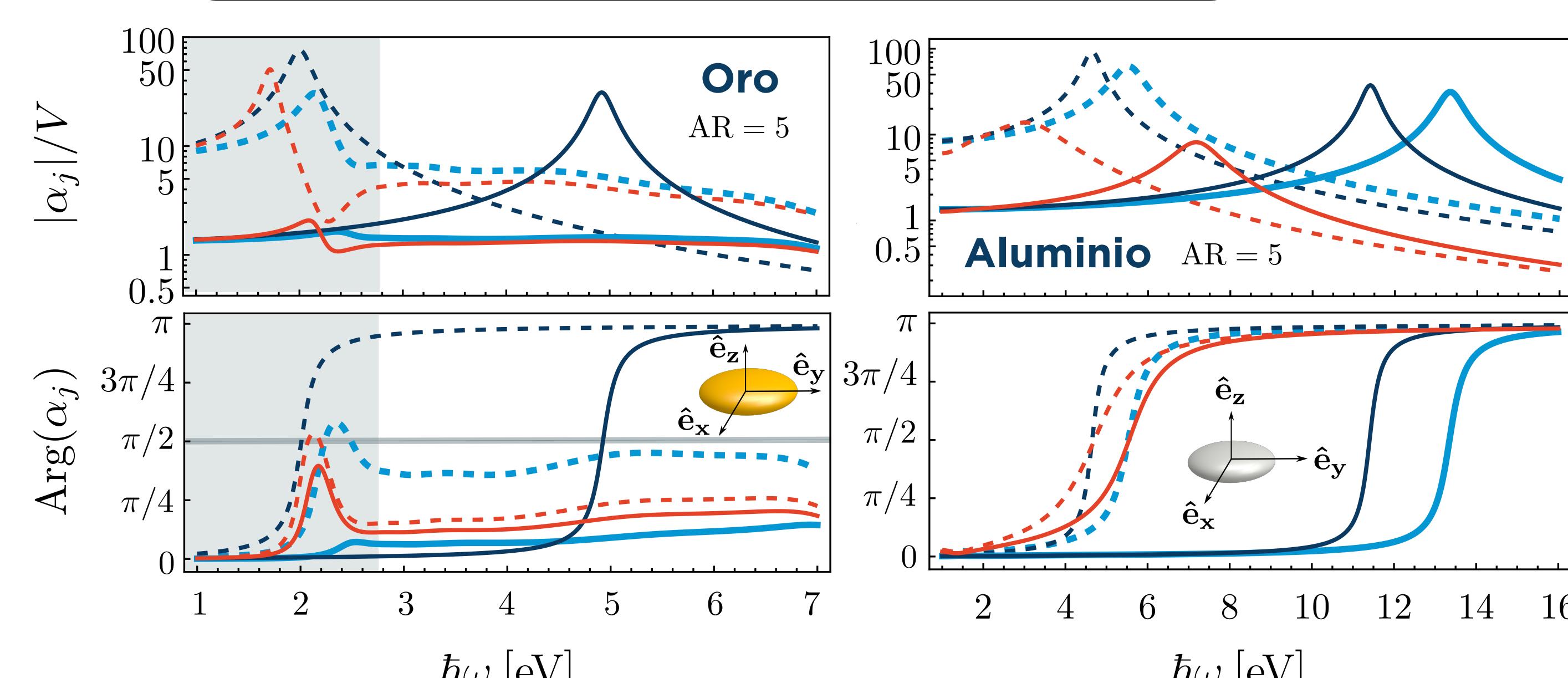
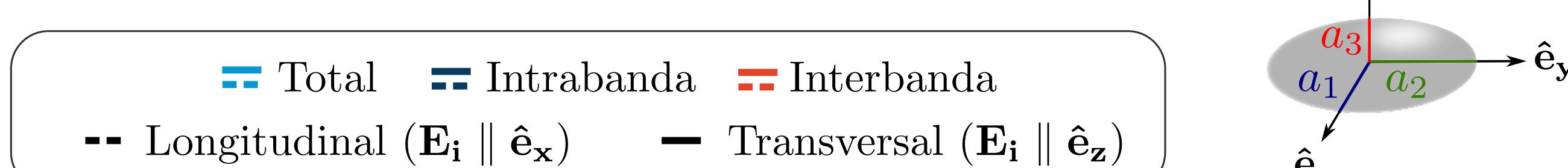
3. Modelado del material

La **respuesta óptica** de un material se describe mediante la **función dieléctrica** $\varepsilon(\omega)$ que considera contribuciones electrónicas **intrabanda** (electrones libres) e **interbanda** [3], que están dadas por χ_{intra} y χ_{inter} , respectivamente. Los electrones libres, en una partícula con dimensiones menores a su **camino libre medio**, interactúan con la superficie, por lo que se realiza una corrección γ_{ef} a la contribución intrabanda, la cual depende de la **geometría** y del **tamaño** de la nanopartícula [3]

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \underbrace{\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_{\text{ef}})}}_{\chi_{\text{intra}}(\omega)} + \chi_{\text{inter}}(\omega),$$

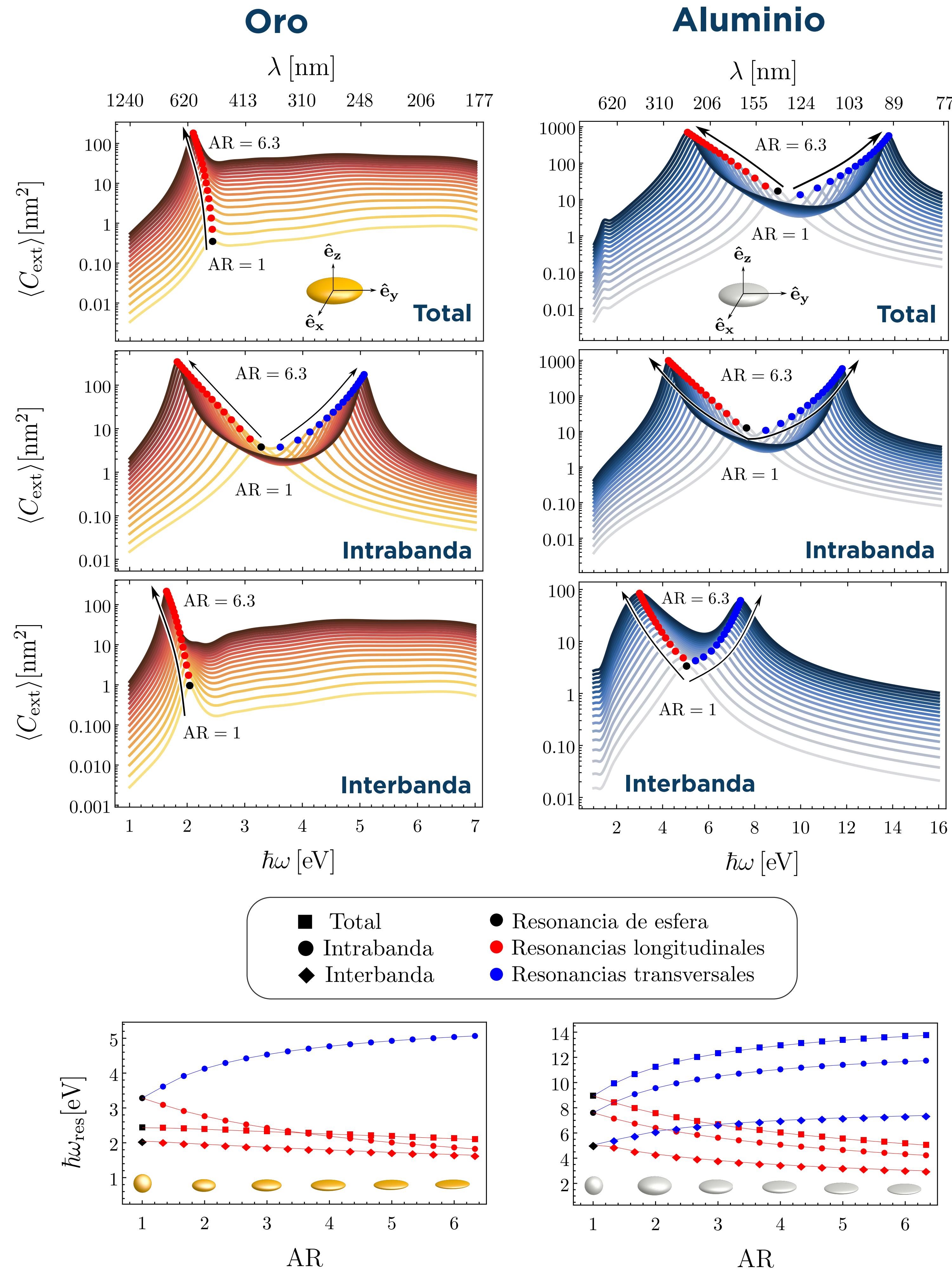
- ω_p : Frecuencia de plasma
 γ_0 : Constante fenomenológica de amortiguamiento
 γ_{ef} : Constante fenomenológica de amortiguamiento efectiva
 v_F : Rapidez de Fermi
 A : Parámetro fenomenológico

donde $\gamma_{\text{ef}} = \gamma_0 + A v_F/L$, donde $A = 1$ y para elipsoides $L = \sqrt[3]{abc}$ [4].



4. Resultados

● Resonancia de esfera ● Resonancias longitudinales ● Resonancias transversales



5. Conclusiones

- En el **oro**, al considerar únicamente los efectos **intrabanda**, es posible distinguir las **resonancias transversales**.
→ Al incluir las transiciones **interbanda**, las **resonancias longitudinales** presentan un **corrimiento hacia el azul** a partir de $AR=3.6$; para valores menores de AR, se observa un **corrimiento hacia el rojo**.
→ En el **aluminio**, al incorporar los efectos **intrabanda** hay un **corrimiento hacia el azul** tanto en las **resonancias longitudinales** como en las **transversales**.
→ En ambos materiales, al aumentar AR, las **resonancias longitudinales** se desplazan hacia el **rojo**, mientras que las **transversales** lo hacen hacia el **azul**.
→ A partir del análisis de las **polarizabilidades** se puede determinar el **origen** de la **resonancia**.

6. Referencias

- [1] J. P. Cuanalo-Fernández, et al. *The Journal of Physical Chemistry C*, **128**(27):11372-11381, 2024.
[2] C. F. Bohren y D. R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 1998.
[3] C. Noguez. *The Journal of Physical Chemistry C*, **111**(10):3806-3819, 2007.
[4] U. Kreibig, et al. *Optical properties of metal clusters*. Springer, 1995.



Sobre la función dieléctrica