

Cálculo de las secciones transversales de extinción, absorción y esparcimiento de elipsoides en la aproximación cuasiestática como primera aproximación de eritrocitos

DANA LARISSA LUNA GONZÁLEZ

I. INTRODUCCIÓN

El estudio de las propiedades ópticas de las células biológicas como los osteoblastos [1], los linfocitos [2], y los eritrocitos [3], es de gran importancia para el área médica. A partir de las propiedades ópticas de las células, se obtiene información de su composición y estado morfológico, lo cual tiene potenciales aplicaciones en el diagnóstico y la detección temprana de diversas enfermedades, incluidos cánceres e infecciones virales [2]. En particular, el estudio de los eritrocitos tiene un papel importante en el diagnóstico de la anemia en sus diferentes tipos y el diseño de nuevas terapias ópticas, como el tratamiento de las venas varicosas [3].

Los eritrocitos sanos presentan forma de discoides cóncavos con longitudes de entre 4 a 9 mm de diámetro. Estos no poseen núcleo, por lo que pueden modelarse como un objeto homogéneo [4]. Debido a su forma, para simplificar el proceso de modelado, se han empleado diferentes opciones como los óvalos de Cassini [4] o funciones en términos de coordenadas esféricas [5]. Sin embargo, el modelo más simple a estudiar como una primera aproximación es un elipsoide. El objetivo este trabajo es el de analizar la convergencia y propiedades físicas de la respuesta óptica de elipsoides de diferentes materiales (oro, plata, aluminio, bismuto y óxido de magnesio) y tamaños dentro de la nanoescala, por medio de las secciones transversales de esparcimiento, absorción y extinción, bajo la aproximación cuasi-estática para, posteriormente, orientarlo a eritrocitos. En la primera sección de este trabajo, se resuelve de forma analítica el problema de esparcimiento de luz por una partícula elipsoidal arbitraria en la aproximación cuasiestática, donde se presentan, además, la secciones transversales de extinción, absorción y esparcimiento. Finalmente, se estudia el esparcimiento de luz por un elipsoide centrado en el origen en la aproximación cuasi-estática. En la segunda sección, se exponen los resultados obtenidos de las secciones transversales de extinción para partículas elipsoidales oblitas de materiales tanto plasmónicos como dieléctricos. En la última sección, denominada Resultados, se discute la implementación del método desarrollado para el caso de los eritrocitos.

I. Aproximación cuasiestática en el problema de esparcimiento de luz por partículas elipsoidales

En el caso de un elipsoide caracterizado por una función dieléctrica ϵ_p , que se encuentra inmerso en un medio caracterizado por una función dieléctrica ϵ_m y cuyo semieje mayor es a , se puede definir el límite cuasiestático cuando el parámetro de tamaño $x = ka$ es mucho menor que la unidad [8], donde $k = 2\pi\sqrt{\epsilon_m}/\lambda$ con λ la longitud de onda. Esta aproximación garantiza que toda la geometría del elipsoide esté sujeta a un campo eléctrico de la misma intensidad y dirección [7]. En esta sección se estudiará el caso del dipolo eléctrico de una esfera para introducir el concepto de polarizabilidad, y más adelante, se desarrollará el dipolo eléctrico para esparcidores arbitrarios en donde se analizarán las regiones de campo cercano, la intermedia y la de radiación.

I.1. Dipolo eléctrico (caso estático)

En electrodinámica clásica, se entiende como *límite cuasiestático* el considerar una partícula de tamaño mucho menor que la longitud de onda de la luz incidente [6]. Para el caso de una partícula esférica, se puede emplear la aproximación cuasiestática al resolver la ecuación de Laplace para el potencial eléctrico ϕ . En particular, esta solución deviene en [9]:

$$\phi = \frac{p}{4\pi\epsilon_m} \left(\frac{\vec{r} \cdot \hat{e}_z}{r^3} \right) = \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{4\pi\epsilon_m r^3} = \frac{p \cos \theta}{4\pi\epsilon_m r^2} \quad (1)$$

donde \vec{p} representa el momento dipolar eléctrico. Si se considera una esfera con permitividad eléctrica ϵ_p , embebida en el mismo medio caracterizado por su función dieléctrica ϵ_m en el cual existe un campo eléctrico uniforme $\vec{E}_0 = E_0 \hat{e}_z$, al resolver la ecuación de Laplace considerando las condiciones de frontera entre la esfera y el medio, se obtiene que el campo eléctrico fuera de la esfera es la superposición del campo eléctrico aplicado y del campo eléctrico producido por un dipolo eléctrico puntual localizado en el origen con momento dipolar [8]:

$$\vec{p} = \epsilon_m \alpha \vec{E}_0 = 4\pi \epsilon_m a^3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \vec{E}_0, \text{ con } \alpha = 4\pi a^3 (\epsilon_1 - \epsilon_m) / (\epsilon_1 + 2\epsilon_m), \quad (2)$$

donde α es la polarizabilidad eléctrica, que representa la facilidad con la que se polariza la esfera. Es decir, el campo eléctrico induce un dipolo eléctrico en la esfera.

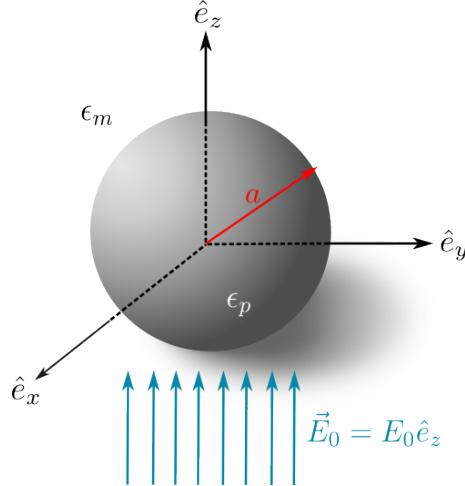


Fig. 1: Esfera de radio r caracterizada por su función dieléctrica ϵ_p y embebida en un medio caracterizado por su función dieléctrica ϵ en la cual incide un campo eléctrico uniforme \vec{E}_0 .

I.2. Dipolo eléctrico (caso dinámico)

En la sección anterior se abordó una solución que asume que el campo eléctrico, por tanto el dipolo inducido, son estáticos. Para resolver el caso dinámico en el límite cuasiestático, se asume ahora que las cargas están localizadas en un volumen finito moviéndose en presencia de un campo eléctrico dinámico; lo cual es equivalente a realizar un análisis en componentes de Fourier de los potenciales y campos de un sistema de cargas y corrientes localizadas en el espacio vacío, con una dependencia armónica $e^{-i\omega t}$, tal que varían en el tiempo y oscilan a la frecuencia ω del campo electromagnético aplicado. De esta forma, la densidad volumétrica de carga $\rho(\vec{r}, t)$ y la densidad de corriente $\vec{J}(\vec{r}, t)$ en la posición \vec{r} se expresan como [10]

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) &= \rho(\vec{r}) e^{-i\omega t}, \\ \vec{J}(\vec{r}, t) &= \vec{J}(\vec{r}) e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (3)$$

considerando que el significado físico lo posee la parte real. Mediante lo anterior, es posible determinar los campos electromagnéticos mediante el potencial vectorial como [10]:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int d^3 r' \frac{\vec{J}(r') e^{i\omega \frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{c}}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{-i\omega t_r}, \quad (4)$$

en donde se emplea la norma de Lorentz [9] y la densidad de corriente se evalúa en el tiempo de retardo $t_r = t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c$.

El comportamiento de los campos electromagnéticos se puede estudiar al delimitar diferentes regiones considerando valores extremos de $k = \omega/c$, como se verá a continuación. Empleando la definición anterior y obviando la dependencia temporal, la Ec. (4) se reescribe como

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \vec{J}(\vec{r}') \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3 r'. \quad (5)$$

En la región de campo cercano, donde $r \ll \lambda$ (o $kr \ll 1$), tal que $\exp(ik|\vec{r}-\vec{r}'|) \rightarrow 1$, se tiene [10]

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{J}(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3 r',$$

mientras que en la región de campo lejano ($kr \gg 1$) dado que la exponencial oscila rápidamente, es suficiente aproximar

$$|\vec{r}-\vec{r}'| \simeq r - \hat{e}_r \cdot \vec{r}', \quad (6)$$

con \hat{e}_r un vector unitario en la dirección de \vec{r} . ¹ Si sólo se consideran los términos que decaen como r^{-1} , el inverso de la distancia en la Ec. (5) puede ser reemplazado por r . Entonces, el potencial vectorial es

$$\lim_{kr \rightarrow \infty} \vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int \vec{J}(\vec{r}') e^{-ik\hat{e}_r \cdot \vec{r}'} d^3 r',$$

que se puede reescribir al realizar la expansión en serie de potencias de la exponencial dentro de la integral de volumen, dando como resultado

$$\lim_{kr \rightarrow \infty} \vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \sum_n \frac{(-ik)^n}{n!} \int \vec{J}(\vec{r}') (\hat{e}_r \cdot \vec{r}')^n d^3 r'.$$

Al considerar únicamente el primer término de la expansión, se concluye que

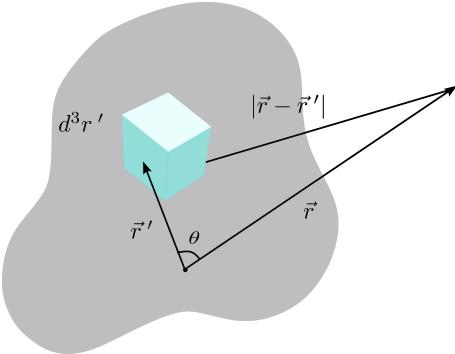


Fig. 2: Vector de posición \vec{r} del volumen y \vec{r}' . Se muestra la distancia $|\vec{r}-\vec{r}'|$ entre estos últimos.

$$\vec{A}(\vec{r}) \approx \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int \vec{J}(\vec{r}') d^3 r', \quad (7)$$

que al realizar una integración por partes, ² se obtiene que

$$\int \vec{J} d^3 r' = - \int \vec{r}' (\nabla' \cdot \vec{J}) d^3 r' = -i\omega \int \vec{r}' \rho(\vec{r}') d^3 r', \quad (8)$$

¹Empleando la ley de cosenos y haciendo una expansión binomial $|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 + (r')^2 - 2rr' \cos \theta} = r\sqrt{1 + (r'/r)^2 - 2((r'/r) \cos \theta)} \simeq r \left\{ 1 - (\hat{e}_r \cdot \vec{r}')/r + 1/2(r'/r)^2 \right\} \simeq r - \hat{e}_r \cdot \vec{r}'$.

²Al considerar $\int_V \vec{r}' (\nabla' \cdot \vec{J}) d^3 r' = \int_{\partial V} \vec{r}' (\vec{J} \cdot d\vec{S}) - \int_V \vec{J} d^3 r'$ y asumiendo que \vec{J} se desvanece en los límites del volumen V , es decir, en la superficie ∂V .

donde se emplea la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \vec{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = i\omega\rho(\vec{r}).$$

Al sustituir la Ec. (8) en la Ec. (7) y considerando que el momento dipolar eléctrico \vec{p} de una distribución de cargas ρ es

$$\vec{p} = \int \vec{r}' \rho(\vec{r}') d^3 r',$$

se obtiene

$$\vec{A}(\vec{r}) = -\frac{i\omega\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int \vec{r}' \rho(\vec{r}') d^3 r' = -\frac{i\omega\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \vec{p}. \quad (9)$$

Al calcular el campo \vec{H} como función del potencial vectorial, y empleando la ley de Faraday-Lenz para determinar el campo eléctrico, se concluye que [10]

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\{ k^2 (\hat{e}_r \times \vec{p}) \times \hat{e}_r \frac{e^{ikr}}{r} + [3\hat{e}_r (\hat{e}_r \cdot \vec{p}) - \vec{p}] \left(\frac{1}{r^3} - \frac{ik}{r^2} \right) e^{ikr} \right\}, \quad (10)$$

$$\vec{H} = \frac{ck^2}{4\pi} (\hat{e}_r \times \vec{p}) \frac{e^{ikr}}{r} \left(1 - \frac{1}{ikr} \right). \quad (11)$$

A partir de las Ecs. (10) y (11) se puede observar que el campo \vec{H} es transversal al vector radial para cualquier distancia, mientras el campo eléctrico tiene componentes paralelas y perpendiculares a \hat{e}_r .

De forma análoga al desarrollo de la Ec. (9) y empleando la Ley de Faraday Lenz, en la zona de radiación cuando $kr \gg 1$, se tiene que al excitar a las fuentes en el sistema mediante una onda electromagnética de frecuencia angular ω , lo que sería equivalente a iluminar al sistema con una onda plana armónica en el tiempo, se induce un dipolo eléctrico \vec{p} que genera campos electromagnéticos \vec{E}_p y \vec{H}_p y que oscilan a la misma frecuencia ω

$$\vec{E}_p = \frac{e^{ikr}}{-ikr} \frac{ik^3}{4\pi\epsilon_m} \hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \vec{p}) e^{i\omega t}, \quad \vec{H}_p = \frac{ck^2}{4\pi} (\hat{e}_r \times \vec{p}) \frac{e^{ikr}}{r} e^{i\omega t}. \quad (12)$$

En el caso particular en que el sistema se ilumine con una onda plana monocromática, es decir, de una sola frecuencia, y polarizada en la dirección \hat{e}_x , que induce un dipolo eléctrico con momento dipolar $\vec{p} = \epsilon_m \alpha E_0 e^{-i\omega t} \hat{e}_x$, se pueden reescribir a los campos generados por el dipolo inducido mediante el vector de amplitud de esparcimiento

$$\vec{X} = \frac{ik^3}{4\pi} \alpha (\hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \hat{e}_x)), \quad (13)$$

como

$$\vec{E}_p = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \vec{X} E_0 e^{ikz}, \quad \vec{H}_p = \frac{k}{\omega\mu} \hat{e}_r \times \vec{E}_p. \quad (14)$$

donde la polarización en la base de vectores esféricos es $\vec{p} = \epsilon_m \alpha E_0 e^{-i\omega t} (\sin \theta \cos \phi \hat{e}_r + \cos \theta \cos \phi \hat{e}_\theta - \sin \phi \hat{e}_\phi)$.
³

II. Secciones transversales

En las secciones anteriores se consideró al sistema integrado por una partícula y por una distribución de cargas localizadas en un volumen finito, sometidas a un campo eléctrico homogéneo y a uno armónico, respectivamente. En esta sección, dado que la interacción luz-materia puede estudiarse mediante cantidades macroscópicas medibles [8], se considera a la partícula embebida en un medio no absorbente e iluminada por una onda plana armónica en el tiempo. Teniendo en cuenta lo anterior, la energía W_{abs} , transportada por los campos electromagnéticos y

³Es decir, $\hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \hat{e}_x) = -\cos \theta \cos \phi \hat{e}_\theta + \sin \phi \hat{e}_\phi$.

que es absorbida por la partícula, se calcula al integrar el promedio temporal del vector de Poynting $\langle \vec{S} \rangle_t$ ⁴ sobre una superficie cerrada A , que por simplicidad puede considerarse una esfera de radio r mayor al de la partícula [Fig. 3], es decir,

$$W_{abs} = - \int_A \langle \vec{S} \rangle_t \cdot \hat{e}_r \, dA,$$

donde debido a que $\langle \vec{S} \rangle_t$ y \hat{e}_r están orientados en la misma dirección, el signo negativo convierte a W_{abs} en una

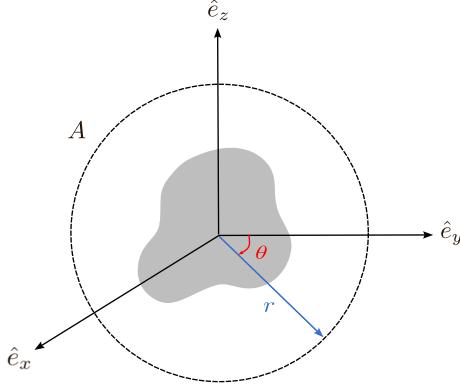


Fig. 3: Esquema de la esfera imaginaria de radio r y superficie A centrada en el origen y en la partícula de interés.

cantidad positiva, de lo contrario, significaría que se genera energía dentro de la esfera.

Dado que el vector de Poynting en cualquier punto en el medio que rodea a la partícula se puede descomponer en tres términos [8]

$$\langle \vec{S}^i \rangle_t = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\{\vec{E}_i \times \vec{H}_i^*\}, \quad \langle \vec{S}^s \rangle_t = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\{\vec{E}_s \times \vec{H}_s^*\}, \quad \langle \vec{S}^{ext} \rangle_t = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\{\vec{E}_i \times \vec{H}_s^* + \vec{E}_s \times \vec{H}_i^*\}, \quad (15)$$

asociados al campo incidente, al campo esparcido y a la interacción entre los dos anteriores, respectivamente, se tiene que $W_{abs} = W_i - W_s + W_{ext}$, donde [8]

$$W_i = - \int_A \langle \vec{S}^i \rangle_t \cdot \hat{e}_r \, dA, \quad W_s = \int_A \langle \vec{S}^s \rangle_t \cdot \hat{e}_r \, dA, \quad W_{ext} = - \int_A \langle \vec{S}^{ext} \rangle_t \cdot \hat{e}_r \, dA, \quad (16)$$

cuyos signos están colocados de forma que sean cantidades positivas.

Para un medio no absorbente, W_i es igual en todas partes, por lo que se anula,⁵ entonces

$$W_{ext} = W_{abs} + W_s. \quad (17)$$

Al considerar el campo incidente $\vec{E}_i = E \hat{e}_x$ polarizado en la dirección \hat{e}_x y a $\vec{H}_i = (1/\mu\omega) \vec{k} \times E \hat{e}_x$ en un medio no absorbente, W_a es independiente del radio r de la esfera imaginaria, por lo que se puede considerar a r lo suficientemente grande para estar en la región de campo lejano donde los campos se comportan como las Ecs. (14), por lo cual, W_{ext} está dado por [8]

$$W_{ext} = I_i \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{Re}\{(\vec{X} \cdot \hat{e}_x)_{\theta=0}\},$$

donde I_i es la irradiancia incidente, que corresponde a la magnitud del vector de Poynting, y por consiguiente,⁶

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_i} = \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{Re}\{(\vec{X} \cdot \hat{e}_x)_{\theta=0}\}, \quad (18)$$

⁴El promedio temporal del vector de Poynting es $\langle \vec{S} \rangle_t = (1/\tau) \int_t^{t+\tau} \vec{S}(t') dt'$, y para campos electromagnéticos del tipo ondas planas es $\langle \vec{S} \rangle_t = (1/2) \operatorname{Re}[\vec{E} \times (\vec{B}/\mu)^*]$, donde $*$ corresponde a la operación complejo conjugado [8].

⁵ $W_i = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |S^i(r, \theta, \phi)| \cos \theta \sin \theta \, d\theta \, d\phi = 0$

⁶Debido al teorema óptico, la extinción sólo depende de la amplitud de esparcimiento en la dirección de propagación y es el efecto combinado de la absorción en la partícula y el esparcimiento por la partícula en todas las direcciones. [8].

que es la sección transversal de extinción y que posee dimensiones de área. La Ec. (18) puede ser reescrita como [8]

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca} \quad (19)$$

donde $C_{abs} = W_{abs}/I_i$ y $C_{sca} = W_s/I_i$ corresponden a las secciones transversales de absorción y esparcimiento, respectivamente. Al sustituir las Ecs. (14) en la Ec. (16) se obtiene

$$C_{sca} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{|\vec{X}|^2}{k^2} \sin \theta d\theta d\phi. \quad (20)$$

Estas secciones transversales son propiedades macroscópicas y medibles, que proveen información sobre la energía absorbida y esparcida por una partícula.

Al reescribir el vector de amplitud de esparcimiento [Ec. (13)] en términos de la base vectorial esférica se obtiene [8]

$$\vec{X} \cdot \hat{e}_x = \frac{ik^3}{4\pi} \alpha (\sin^2 \theta \cos^2 \phi - 1),$$

y sustituyéndolo en la Ec. (18), la sección transversal de extinción es

$$C_{ext} = k \operatorname{Re} [(i\alpha(\sin^2 \theta \cos^2 \phi - 1))_{\theta=0}] = k \operatorname{Re} [-i\alpha] = k \operatorname{Im}[\alpha].$$

Si el esparcimento es despreciable con respecto a la absorción, la extinción corresponde a la absorción en mayor medida, tal que [8]

$$C_{abs} = k \operatorname{Im}[\alpha]. \quad (21)$$

Además, al sustituir la Ec. (13) en la Ec. (20), se obtiene [8]

$$C_{sca} = \frac{|\alpha|^2 k^2}{6\pi}. \quad (22)$$

III. Elipsoide en la aproximación cuasiestática

En esta sección se busca estudiar el esparcimiento de luz por un elipsoide centrado en el origen, con semiejes (a, b, c) paralelos a los ejes $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$ respectivamente, y con dimensiones tales que $\lambda \gg a > b > c$. Mediante las coordenadas elipsoidales confocales⁷ [ver Fig. 4] se puede obtener una solución analítica (pero aproximada) al problema de esparcimiento de luz por un elipsoide. Estas describen la superficie del elipsoide como [11]

$$\frac{x^2}{a^2 - u} + \frac{y^2}{b^2 - u} + \frac{z^2}{c^2 - u} = 1, \quad (23)$$

donde debe determinarse el valor del parámetro u . La Ec. (23) es una ecuación de tercer grado para u , por lo que las soluciones (reales) son un conjunto de tres valores $\{\xi, \eta, \zeta\}$ tales que⁸

$$-\infty < \xi < c^2 < \eta < b^2 < \zeta < a^2 \quad (24)$$

que corresponden a tres formas cuadráticas con focos en común.

$$\frac{x^2}{a^2 - \xi} + \frac{y^2}{b^2 - \xi} + \frac{z^2}{c^2 - \xi} = 1, \quad (25)$$

$$\frac{x^2}{a^2 - \eta} + \frac{y^2}{b^2 - \eta} + \frac{z^2}{c^2 - \eta} = 1, \quad (26)$$

$$\frac{x^2}{a^2 - \zeta} + \frac{y^2}{b^2 - \zeta} + \frac{z^2}{c^2 - \zeta} = 1. \quad (27)$$

⁷Existen diversas definiciones que pueden revisarse en [11], sin embargo, se emplea la proporcionada en [12].

⁸La función $f(u) = x^2/(a^2 - u) + y^2/(b^2 - u) + z^2/(c^2 - u) - 1$ resulta ser continuamente diferenciable en el dominio $(-\infty, c^2) \cap (c^2, b^2) \cap (b^2, a^2)$ y estrictamente creciente en cada intervalo que lo compone, de tal forma que, al calcular los límites en cada extremo de los intervalos, se concluye que existe exactamente una raíz en cada intervalo.

Si ξ es constante, se obtiene un elipsoide confocal. De esta forma, la superficie de la partícula a estudiar se tiene cuando $\xi = 0$. Cuando η es constante, se obtiene un hiperboloide de una hoja y cuando ζ es constante se tiene un hiperboloide de dos hojas.

Es así como, a cualquier punto (x, y, z) le corresponde un conjunto de coordenadas elipsoidales (ξ, η, ζ) . Sin embargo, esto no es cierto para el caso contrario. Estas coordenadas determinan ocho puntos simétricamente localizados en los octantes cuyo espacio está partitionado por los ejes coordinados x, y, z anteriormente mencionados.

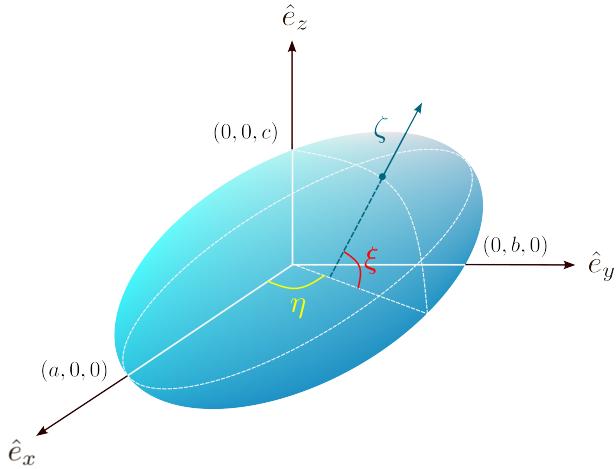


Fig. 4: Sistema coordenado elipsoidal con un elipsoide centrado en el origen, con semiejes (a, b, c) , $a > b > c$.

Las ecuaciones anteriores se pueden reescribir de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{a^2+\xi} & \frac{1}{b^2+\xi} & \frac{1}{c^2+\xi} \\ \frac{1}{a^2+\eta} & \frac{1}{b^2+\eta} & \frac{1}{c^2+\eta} \\ \frac{1}{a^2+\zeta} & \frac{1}{b^2+\zeta} & \frac{1}{c^2+\zeta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

cuya solución está dada por las expresiones

$$x^2 = \frac{(a^2 + \xi)(a^2 + \eta)(a^2 + \zeta)}{(b^2 - a^2)(c^2 - a^2)}, \quad (28)$$

$$y^2 = \frac{(b^2 + \xi)(b^2 + \eta)(b^2 + \zeta)}{(a^2 - b^2)(c^2 - b^2)}, \quad (29)$$

$$z^2 = \frac{(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}. \quad (30)$$

En el problema de esparcimiento de luz sin retardo (o límite cuasiestático) se resuelve la ecuación de Laplace para el potencial eléctrico; en un sistema coordenado general, esta ecuación se escribe en términos de coordenadas generalizadas [12]

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \phi}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_3 h_1}{h_2} \frac{\partial \phi}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial \phi}{\partial q_3} \right) \right], \quad (31)$$

donde ϕ es una función escalar, y h_i con $i = 1, 2, 3$ los factores de escala que, para coordenadas elipsoidales se asocian como $1 \rightarrow \xi, 2 \rightarrow \eta$ y $3 \rightarrow \zeta$, y se determinan al hacer un cambio de base de coordenadas cartesianas a elipsoidales. Para ello, se encuentra un vector unitario en la dirección de la i -ésima coordenada, que mide cómo es que cambia el vector posición $\vec{r} = (x, y, z)$ en una dirección dada y se define como [12]

$$\hat{e}_i = \frac{1}{h_i} \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \right), \quad (32)$$

con

$$h_i = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \right| = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial q_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i} \right)^2}. \quad (33)$$

En particular, para el caso de coordenadas elipsoidales, considerando la variación en la dirección x , empleando la Ec. (28), se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \xi} &= \frac{1}{2} \left(\frac{(a^2 + \xi)(a^2 + \eta)(a^2 + \zeta)}{(b^2 - a^2)(c^2 - a^2)} \right)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{(a^2 + \xi)(a^2 + \eta)(a^2 + \zeta)}{(b^2 - a^2)(c^2 - a^2)} \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{a^2 + \xi} \sqrt{\frac{(a^2 + \xi)(a^2 + \eta)(a^2 + \zeta)}{(b^2 - a^2)(c^2 - a^2)}} \\ &= \frac{1}{2x} \frac{\partial x^2}{\partial \xi}, \end{aligned}$$

por tanto,

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = \frac{1}{2} \frac{x}{(a^2 + \xi)}.$$

Empleando las Ecs. (29) y (30) para y y z , respectivamente, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial \xi} &= \frac{1}{2y} \frac{\partial y^2}{\partial \xi} = \frac{1}{2} \frac{y}{(b^2 + \xi)}, \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} &= \frac{1}{2z} \frac{\partial z^2}{\partial \xi} = \frac{1}{2} \frac{z}{(c^2 + \xi)}. \end{aligned}$$

De esta forma, el cuadrado del primer factor de escala h_1 es

$$h_1^2 = \frac{1}{4} \left[\frac{x^2}{(a^2 + \xi)^2} + \frac{y^2}{(b^2 + \xi)^2} + \frac{z^2}{(c^2 + \xi)^2} \right]. \quad (34)$$

Por economía, se define a la función $g(u) = (u - \xi)(u - \eta)(u - \zeta)$, que permite reescribir la Ec. (23) como

$$1 - \frac{x^2}{a^2 + u} - \frac{y^2}{b^2 + u} - \frac{z^2}{c^2 + u} = \frac{g(u)}{(a^2 + u)(b^2 + u)(c^2 + u)}, \quad (35)$$

donde $g(u)$ es una función cúbica con tres raíces reales dentro del rango descrito por las limitaciones de cada variable, y al derivarla con respecto de u se obtiene

$$\frac{x^2}{(a^2 + u)^2} + \frac{y^2}{(b^2 + u)^2} + \frac{z^2}{(c^2 + u)^2} = \frac{g(u)}{[f(u)]^2} \left[\frac{1}{u - \xi} + \frac{1}{u - \zeta} + \frac{1}{u - \eta} - \left(\frac{1}{a^2 + u} + \frac{1}{b^2 + u} + \frac{1}{c^2 + u} \right) \right], \quad (36)$$

con

$$f(u) = \sqrt{(a^2 + u)(b^2 + u)(c^2 + u)}, \quad (37)$$

por medio del cual se puede reescribir al primer factor de escala de la Ec. (38) como

$$h_1^2 = \frac{1}{4} \frac{g(u)}{[f(u)]^2} \left[\frac{(u - \zeta)(u - \eta) + (u - \xi)(u - \eta) + (u - \xi)(u - \zeta)}{g(u)} - \left(\frac{1}{a^2 + u} + \frac{1}{b^2 + u} + \frac{1}{c^2 + u} \right) \right].$$

Dado que ξ es una raíz de $g(u)$, entonces, $g(u) = 0$, por lo que el factor de escala h_1 es

$$h_1 = \frac{\sqrt{(\xi - \eta)(\xi - \zeta)}}{2f(\xi)}. \quad (38)$$

Mediante un proceso semejante, se tiene que

$$h_2 = \frac{\sqrt{(\eta - \xi)(\eta - \zeta)}}{2f(\eta)} \quad \text{y} \quad h_3 = \frac{\sqrt{(\zeta - \xi)(\zeta - \eta)}}{2f(\zeta)}. \quad (39)$$

Sustituyendo las Ecs. (38) y (39) en la Ec. (31) y simplificando,

$$\nabla^2 \phi = \frac{4}{\Upsilon} \left[(\eta - \zeta) f(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f(\xi) \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + (\zeta - \xi) f(\eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \left(f(\eta) \frac{\partial \eta}{\partial \eta} \right) + (\xi - \zeta) f(\zeta) \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(f(\zeta) \frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right) \right],$$

donde a Υ se le conoce como el valor absoluto del determinante funcional [14]

$$\Upsilon = (\xi - \eta)(\zeta - \xi)(\eta - \zeta). \quad (40)$$

Como resultado de lo anterior, la ecuación de Laplace en coordenadas elipsoidales se reescribe como

$$\nabla^2 \phi = (\eta - \zeta) f(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f(\xi) \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + (\zeta - \xi) f(\eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \left(f(\eta) \frac{\partial \eta}{\partial \eta} \right) + (\xi - \eta) f(\zeta) \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(f(\zeta) \frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right) = 0. \quad (41)$$

La ecuación anterior se puede resolver mediante el método de reducción de orden, que consiste en proponer una solución no trivial y buscar una segunda solución. [13]. cuya solución está determinada por la forma del campo incidente, descrito por el potencial anterior, y que cumple las condiciones de contorno.

El potencial eléctrico solución a la Ec. (41) hereda la simetría del sistema de interés, el cual consiste en un elipsoide homogéneo iluminado por un campo eléctrico incidente uniforme alineado a lo largo del eje \hat{e}_z . Por tanto, a cada punto del espacio descrito por las coordenadas elipsoidales le corresponde ocho distintos en las coordenadas cartesianas. Es decir, las propiedades de simetría del sistema en el potencial eléctrico son:

$$\phi(x, y, z) = \phi(-x, y, z) = \phi(x, -y, z) = \phi(-x, -y, z), \quad (42)$$

$$\phi(x, y, -z) = \phi(-x, y, -z) = \phi(x, -y, -z) = \phi(-x, -y, -z), \quad (43)$$

donde x, y, z son positivas. Entonces, solo se tiene que considerar el potencial en dos octantes: uno con z positivo y otro con z negativo.

Debido al esparcimiento producido por la partícula, se debe de considerar un potencial de perturbación ϕ_p . En consecuencia, el potencial fuera de la partícula ϕ_{ext} está formado por la superposición del potencial incidente ϕ_0 y el potencial de perturbación ϕ_p

$$\phi_{ext}(\xi, \eta, \zeta) = \phi_0(\xi, \eta, \zeta) + \phi_p(\xi, \eta, \zeta), \quad (44)$$

donde el potencial incidente es el potencial eléctrico asociado a una onda plana

$$\phi_0 = -E_0 r \cos \theta = -E_0 z = -E_0 \left[\frac{(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)} \right]^{1/2}, \quad (45)$$

en donde se empleó la Ec. (30).

Para distancias lo suficientemente lejanas a la partícula, es decir, cuando $\xi \gg a^2$, al factorizar ξ de la Ec. (28), se obtiene

$$\frac{x^2}{\frac{a^2}{\xi} + 1} + \frac{y^2}{\frac{b^2}{\xi} + 1} + \frac{z^2}{\frac{c^2}{\xi} + 1} = \xi,$$

donde

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \left(\frac{x^2}{\frac{a^2}{\xi} + 1} + \frac{y^2}{\frac{b^2}{\xi} + 1} + \frac{z^2}{\frac{c^2}{\xi} + 1} \right) = x^2 + y^2 + z^2 = r^2,$$

entonces, $\xi \simeq r^2$ en el límite asintótico. Asimismo, en esta aproximación el potencial de perturbación es despreciable, por lo que

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \phi_p = 0. \quad (46)$$

Al considerar ϕ_{int} y ϵ_p el potencial y la permitividad eléctrica en el interior del elipsoide y las mismas cantidades ϕ_{ext} y ϵ_m para el exterior de este, como el potencial es continuo en la superficie del elipsoide y la componente perpendicular del campo eléctrico por ausencia de cargas externas también [9]

$$\phi_{int}|_{\xi=0} = \phi_{ext}|_{\xi=0}, \quad (47a)$$

$$\epsilon_p \frac{\partial \phi_{int}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = \epsilon_m \frac{\partial \phi_{ext}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0}. \quad (47b)$$

Reescribiendo los potenciales ϕ_{int} y ϕ_0 de la forma

$$\phi(\xi, \eta, \zeta) = F(\xi)[(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2}, \quad (48)$$

se obtiene que, para que satisfagan la Ec. (41), se tiene que cumplir

$$(\eta - \zeta)[(c^2 + \zeta)(c^2 + \eta)]^{1/2} \left[f(\xi) \frac{d}{d\xi} \left(f(\xi) \frac{dF(\xi)}{d\xi} \right) - \frac{1}{4} F(\xi)(a^2 + b^2 + 2\xi) \right] = 0, \quad (49)$$

por lo que resolver la Ec. (41) es equivalente a resolver

$$f(\xi) \frac{d}{d\xi} \left(f(\xi) \frac{dF(\xi)}{d\xi} \right) - \left(\frac{a^2 + b^2}{4} + \frac{\xi}{2} \right) F(\xi) = 0. \quad (50)$$

La ecuación anterior es una ecuación diferencial ordinaria lineal de segundo orden, por lo que existen dos soluciones no triviales linealmente independientes. Una de estas soluciones es

$$F_1(\xi) = (c^2 + \xi)^{1/2}, \quad (51)$$

y la segunda solución se obtiene mediante el método de reducción de orden. Como $F_1(\xi)$ es solución de la Ec. (41), se propone una segunda solución dada por $F_2(\xi) = v(\xi)F_1(\xi)$ donde $v(\xi)$ se determina al sustituir dicha solución en la ecuación diferencial dada, reduciéndola a una ecuación de primer orden donde la variable dependiente será v . Derivando la ecuación anterior respecto a ξ

$$\begin{aligned} \frac{dF_2(\xi)}{d\xi} &= F_1(\xi) \frac{dv(\xi)}{d\xi} + v(\xi) \frac{F_1(\xi)}{d\xi}, \\ \frac{d^2F_2(\xi)}{d\xi^2} &= F_1(\xi) \frac{d^2v(\xi)}{d\xi^2} + 2 \frac{dv(\xi)}{d\xi} \frac{dF_1(\xi)}{d\xi} + v(\xi) \frac{d^2F_1(\xi)}{d\xi^2}, \end{aligned}$$

y sustituyendo las derivadas anteriores en la Ec. (51) y simplificando, se obtiene

$$f^2(\xi)F_1(\xi) \frac{d^2v(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dv(\xi)}{d\xi} \left[f(\xi)F_1(\xi) \frac{df(\xi)}{d\xi} + 2f^2(\xi) \frac{dF_1(\xi)}{d\xi} \right] = 0.$$

Haciendo el cambio de variable $V(\xi) = dv(\xi)/d\xi$ y reordenando términos resulta en

$$\frac{1}{V(\xi)} \frac{dV(\xi)}{d\xi} = -\frac{1}{f^2(\xi)F_1(\xi)} \left[f(\xi)F_1(\xi) \frac{df(\xi)}{d\xi} + 2f^2(\xi) \frac{dF_1(\xi)}{d\xi} \right],$$

donde la integral indefinida de la ecuación anterior da como resultado

$$\ln[V(q)] = -\ln[F_1^2(q)f(q)],$$

entonces,

$$\frac{dv(q)}{dq} = \frac{1}{F_1^2(q)f(q)}.$$

Como $dv(q)/dq$ es distinto de cero, $v(q)$ es distinto de una constante. Integrando lo anterior se tiene que

$$v(\xi) = \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)},$$

por lo tanto,

$$F_2(\xi) = F_1(\xi) \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)}. \quad (52)$$

Al escribir explícitamente el integrando, usando las Ecs. (51) y (52), y haciendo una integración por partes con $u = 1/(a^2 + q)^{1/2}$ y $dv = 1/[(c^2 + q)^{3/2}(b^2 + q)^{1/2}]$ se obtiene

$$\begin{aligned} F_2(\xi) &= F_1(\xi) \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{(c^2 + q)[(a^2 + q)(b^2 + q)(c^2 + q)]^{1/2}} \\ &= \frac{F_1(\xi)}{c^2 - b^2} \left[\frac{b^2 + q}{(a^2 + q)(c^2 + q)} \right]^{1/2} \Big|_{\xi}^{\infty} - \int_{\xi}^{\infty} \sqrt{\frac{b^2 + q}{c^2 + q}} \frac{dq}{(c^2 - b^2)(a^2 + q)^{3/2}}. \end{aligned} \quad (53)$$

Reescribiendo la segunda integral

$$\int_{\xi}^{\infty} \frac{\sqrt{\frac{b^2+q}{a^2+q}} \sqrt{\frac{b^2+q}{a^2+q}} \sqrt{a^2 - c^2} dq}{\sqrt{a^2 - c^2}(c^2 - b^2) \sqrt{\frac{c^2+q}{a^2+q}} \sqrt{\frac{b^2+q}{c^2+q}} (a^2 + q)^{3/2} \sqrt{\frac{c^2+q}{a^2+q}}}, \quad (54)$$

y considerando que

$$\frac{d}{dq} \left(E \left(\arcsen \left(\frac{\sqrt{a^2 - c^2}}{\sqrt{a^2 + q}} \right) \middle| \frac{a^2 - b^2}{a^2 - c^2} \right) \right) = -\frac{\sqrt{\frac{b^2+q}{a^2+q}} \sqrt{a^2 - c^2}}{(a^2 + q)^{3/2} \sqrt{\frac{c^2+q}{a^2+q}}}$$

al sustituir en la Ec. (54) y haciendo uso del teorema fundamental del cálculo, se obtiene que la segunda solución a la Ec. (50) es

$$F_2(\xi) = \frac{2F_1(\xi)}{c^2 - b^2} \left\{ \left[\frac{b^2 + q}{(a^2 + q)(c^2 + q)} \right]^{1/2} - \frac{1}{(a^2 - c^2)^{1/2}} E \left(\arcsen \left(\frac{\sqrt{a^2 - c^2}}{a^2 + q} \right) \middle| \frac{a^2 - b^2}{a^2 - c^2} \right) \right\} \Big|_{\xi}^{\infty}, \quad (55)$$

donde $E(\phi|m)$ es una integral elíptica de segundo tipo definida como [15]

$$E(x|k) = \int_0^x \frac{\sqrt{1 - k^2 t^2}}{1 - t^2} dt, \quad 0 \leq m \leq 1, \quad (56)$$

donde el módulo angular es $\alpha = \arcsen k$ y k es la excentricidad. En el primer límite de integración (∞) de $F_2(\xi)$ al evaluar se obtiene que el primer sumando es cero, y en el segundo límite la función arcoseno es cero. De esta forma, la parte angular de la integral es cero, es decir, $E(0|m) = 0$. En consecuencia, considerando la definición de F_1 en la Ec. (51) se tiene que F_1 y F_2 cumplen

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} F_1(\xi) = c \quad \text{y} \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} F_2(\xi) = 0. \quad (57)$$

De esta forma, considerando que F_1 no satisface la condición impuesta sobre ϕ_p en la Ec. (46) y que necesariamente el potencial dentro de la partícula debe de ser finito, lo cual F_2 no satisface, los potenciales ϕ_{int} y ϕ_p , propuestos como en la Ec. (48), están dados por

$$\phi_{int} = C_1 F_1(\xi) [(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2}, \quad (58)$$

$$\phi_p = C_2 F_2(\xi) [(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2}, \quad (59)$$

donde C_1 y C_2 son constantes a determinar a partir de las condiciones de frontera dadas por las Ecs. (47). Empleando la primera condición de contorno [Ec. (47a)]

$$C_1 F_1(\xi) [(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2} = E_0 \left[\frac{(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)} \right]^{1/2} + C_2 F_2(\xi) [(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2},$$

y al sustituir las Ecs. (51) y (52) en la ecuación anterior se obtiene

$$C_2 \int_0^\infty \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)} - C_1 = \frac{E_0}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}}. \quad (60)$$

Al definir

$$L^{(3)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)}, \quad (61)$$

entonces, se puede reescribir la Ec. (60) como

$$C_2 L^{(3)} \left(\frac{2}{abc} \right) - C_1 = \frac{E_0}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}}, \quad (62)$$

y, al usar la segunda condición de contorno [Ec. (47b)], se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_p C_1}{2} \left[\frac{(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(c^2 + \xi)} \right]^{1/2} &= \frac{\epsilon_m E_0}{2} \left[\frac{(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(c^2 + \xi)(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)} \right]^{1/2} + \frac{\epsilon_m C_2}{2} \left[\frac{(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(c^2 + \xi)} \right]^{1/2} \int_\xi^\infty \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)} \\ &\quad + \epsilon_m C_2 [(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2} \frac{d}{d\xi} \left\{ \int_\xi^\infty \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)} \right\}, \end{aligned}$$

donde la integral del tercer sumando es

$$\frac{d}{d\xi} \left[\int_\xi^\infty \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)} \right] = \frac{d}{d\xi} \left[\lim_{a \rightarrow \infty} \int_\xi^a \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)} \right] = - \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{(c^2 + \xi)f(\xi)} = - \frac{1}{(c^2 + \xi)f(\xi)};$$

de tal forma que, al evaluar en $\xi = 0$, se obtiene

$$\epsilon_m C_2 \left(\frac{2}{abc} \right) (L^{(3)} - 1) - \epsilon_p C_1 = \frac{\epsilon_m E_0}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}}. \quad (63)$$

Las constantes C_1 y C_2 se obtienen a partir de resolver el sistema de ecuaciones entre las Ecs. (62) y (63), por lo cual, al multiplicar la Ec. (62) por ϵ_p y restarla la Ec. (63), al simplificar se obtiene que

$$C_2 = \frac{abc}{2} \frac{E_0(\epsilon_p - \epsilon_m)}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}} \left[L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m) + \epsilon_m \right]^{-1},$$

por lo tanto, al sustituir C_2 en la Ec. (62) se obtiene una expresión para C_1

$$C_1 = \frac{E_0}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}} \left\{ \left[1 + \frac{\epsilon_m}{L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m)} \right]^{-1} - 1 \right\}.$$

De esta forma, ya se puede determinar el potencial dentro de la partícula sustituyendo F_1 y C_1 en la Ec. (58), por lo que

$$\phi_{int} = \frac{1}{1 + \frac{L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m)}{\epsilon_m}} \phi_0, \quad (64)$$

$$\phi_p = \frac{abc}{2} \frac{\frac{(\epsilon_m - \epsilon_p)}{\epsilon_m} \int_\xi^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)}}{1 + \frac{L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m)}{\epsilon_m}} \phi_0. \quad (65)$$

A pesar de que inicialmente se había considerado el octante donde x, y, z eran positivas, las ecuaciones anteriormente obtenidas representan el potencial en todos los puntos del espacio, como consecuencia de la simetría de la partícula.

Al considerar distancias r muy alejadas del origen tales que $\xi \simeq r^2 \gg a^2$

$$\int_\xi^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)} = \int_\xi^\infty \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)} = \int_\xi^\infty \frac{dq}{q^{5/2}} = \frac{2}{3} \xi^{-3/2},$$

y entonces el potencial ϕ_p está dado por

$$\phi_p \sim \frac{E_0 \cos \theta}{r^2} \frac{\frac{abc}{3} \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_m}}{1 + \frac{L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m)}{\epsilon_m}}, \quad (r \gg a) \quad (66)$$

cuya expresión es equivalente a la de un dipolo puntual dado por

$$\vec{p} = 4\pi\epsilon_m abc \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{3\epsilon_m + 3L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m)} \vec{E}_0. \quad (67)$$

Entonces, la polarizabilidad $\alpha^{(3)}$ de un elipsoide en un campo paralelo al eje z es

$$\alpha^{(3)} = V \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_m + L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m)}, \quad (68)$$

donde $V = 4\pi abc/3$ es el volumen del elipsoide. De manera análoga, las polarizabilidades $\alpha^{(1)}$ y $\alpha^{(2)}$ cuando el campo es aplicado en los ejes x y y son

$$\alpha^{(1)} = 4\pi abc \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{3\epsilon_m + 3L^{(1)}(\epsilon_p - \epsilon_m)}, \quad \alpha^{(2)} = 4\pi abc \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{3\epsilon_m + 3L^{(2)}(\epsilon_p - \epsilon_m)},$$

donde

$$L^{(1)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)f(q)}, \quad \text{y} \quad L^{(2)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(b^2 + q)f(q)}.$$

Se puede concluir en general que la polarizabilidad en una dirección arbitraria j , paralela a algún eje cartesiano es

$$\alpha^{(j)} = V \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_m + L^{(j)}(\epsilon_p - \epsilon_m)} \quad (69)$$

con $L^{(j)}$ conocido como *factor geométrico*, dado por la integral

$$L^{(j)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(a_j^2 + q)f(q)} \quad (70)$$

donde el superíndice (j) indica la dirección en la que se calcula el factor de geométrico y a_j denota al semieje del elipsoide orientado en esa misma dirección. Cabe mencionar que los factores geométricos satisfacen que $L^{(1)} \leq L^{(2)} \leq L^{(3)}$, ⁹ y que sólo dos de los tres son independientes, ya que tienen que cumplir la relación

$$L^{(1)} + L^{(2)} + L^{(3)} = 1, \quad (71)$$

pues,

$$L^{(1)} + L^{(2)} + L^{(3)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \left[\frac{1}{(a^2 + q)} + \frac{1}{(b^2 + q)} + \frac{1}{(c^2 + q)} \right] \frac{dq}{f(q)},$$

que al simplificar se obtiene

$$L^{(1)} + L^{(2)} + L^{(3)} = -abc \int_0^\infty \frac{d}{dq} \left(\frac{1}{f(q)} \right) dq,$$

donde usando el teorema fundamental la integral es

$$\int_0^\infty \frac{d}{dq} \left(\frac{1}{f(q)} \right) dq = \frac{1}{f(q)} \Big|_{(abc)^2}^\infty = -\frac{1}{abc},$$

y por consiguiente, se cumple la Ec. (71).

⁹Debido a la simetría del elipsoide.

En el caso en el que los semiejes son iguales ($a = b = c$), es decir, en el caso de una esfera se tiene que

$$L_{\text{esfera}} = L^{(1)} = L^{(2)} = L^{(3)} = \frac{a^3}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)^{5/2}} = \frac{1}{3}.$$

Una clase especial de elipsoides son los *esferoides*, los cuales tienen dos ejes de igual longitud, por lo cual, solo uno de los factores geométricos es independiente. El esferoide prolato [Fig. 5a], para el cual $b = c > a$ y $L_2 = L_3$ es generado por la rotación de una elipse sobre su eje mayor; el esferoide oblato [Fig. 5b], para el cual $b = a > c$ y $L_1 = L_2$ es generado al rotar una elipse sobre su eje menor. Para los esferoides, se tiene una expresión analítica para L_1 como función de la excentricidad e [8]

- Esferoide prolato:

$$L_1 = \frac{1 - e^2}{e^2} \left(-1 + \frac{1}{2e} \ln \frac{1+e}{1-e} \right) \quad e^2 = 1 - \frac{b^2}{a^2} \quad (72)$$

- Esferoide oblato:

$$L_1 = \frac{g(e)}{2e^2} \left[\frac{\pi}{2} - \tan^{-1} g(e) \right] - \frac{g^2(e)}{2}, \quad (73)$$

$$g(e) = \left(\frac{1 - e^2}{e^2} \right)^{1/2}, \quad e^2 = 1 - \frac{c^2}{a^2} \quad (74)$$

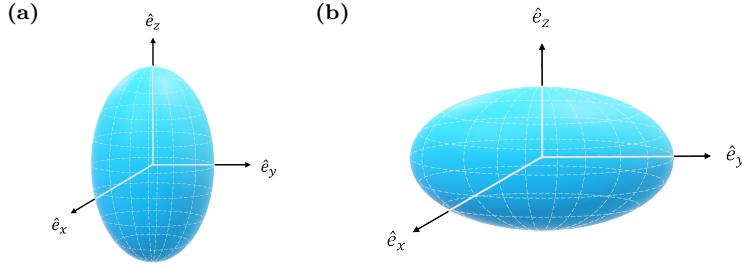


Fig. 5: Clases especiales de elipsoides. **a)** Prolato. El eje mayor del elipsoide está orientado en la dirección del eje \hat{e}_z . **b)** Oblato. El eje mayor del elipsoide está orientado en la dirección del eje \hat{e}_y .

II. RESULTADOS

Dado que en los sistemas biológicos las partículas se encuentran aleatoriamente orientadas, es de gran utilidad considerar las secciones transversales promedio $\langle C_{abs} \rangle$ y $\langle C_{sca} \rangle$, que son independientes de la polarización de la luz incidente,¹⁰ éstas están dadas por [8]:

$$\begin{aligned} \langle C_{abs} \rangle &= \frac{k}{3} \text{Im}\{\alpha^{(1)} + \alpha^{(2)} + \alpha^{(3)}\}, \\ \langle C_{sca} \rangle &= \frac{k^4}{3(6\pi)} \left(\alpha^{(1)} + \alpha^{(2)} + \alpha^{(3)} \right)^2. \end{aligned}$$

En este trabajo se realizaron los cálculos para elipsoides oblatos, por lo cual, debido a la simetría del elipsoide, se satisface que $C_{ext}^{(1)} = C_{ext}^{(2)}$.

En la Fig. 6a, dado que se trata de un elipsoide oblato, al considerar $\langle C_{ext} \rangle$ se observan dos frecuencias en las que la sección transversal es máxima, las cuales coinciden con las frecuencias asociadas a $C_{ext}^{(1)}$ y $C_{ext}^{(3)}$ cuando éstas se maximizan. En la Fig. 6b se observa que en partículas pequeñas, la absorción tiene una contribución mayor en la extinción que el esparcimiento.

A continuación se presentan los cálculos de las secciones transversales de extinción considerando nanopartículas elipsoidales oblatas cuya función dieléctrica está caracterizada por el modelo de Drude para aluminio [16] y por datos experimentales para plata [17], oro [17], bismuto [18] y óxido de magnesio [19].

¹⁰Considerando que las partículas no sean ópticamente activas.

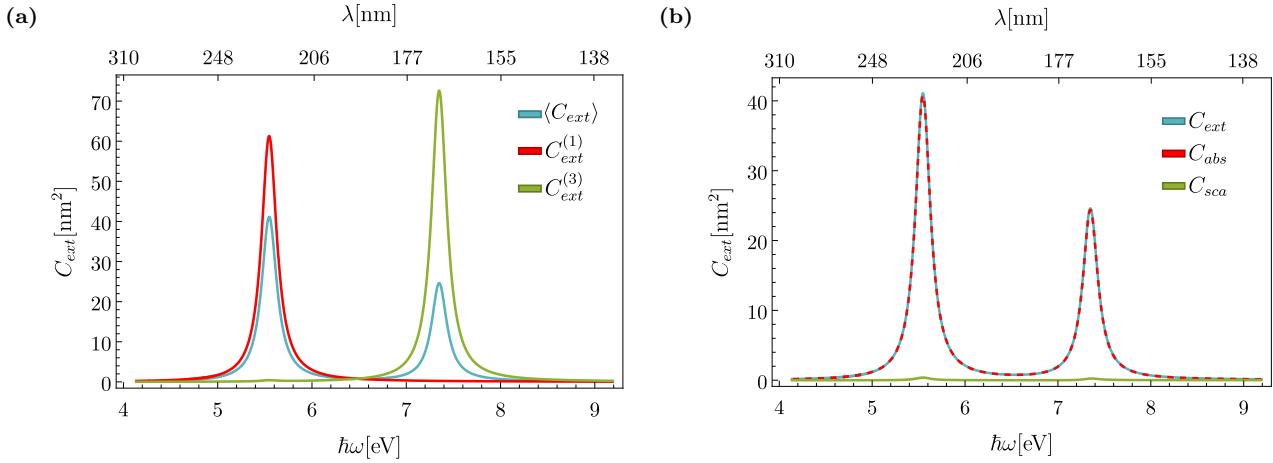


Fig. 6: Secciones transversales como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de aluminio caracterizada por su función dieléctrica dada por el modelo de Drude ($\hbar\omega_p = 13.142$ eV, $\hbar\gamma = 0.197$ eV), con semiejes $a = b = 1.5$ nm, $c = 1$ nm e inmersa en agua ($n_m = 1.33$). **a)** Sección transversal de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$, $C_{ext}^{(1)}$ y $C_{ext}^{(3)}$. **b)** Sección transversal de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$, sección transversal de absorción promedio $\langle C_{abs} \rangle$ y sección transversal de esparcimiento promedio $\langle C_{sca} \rangle$.

Aluminio y plata

En la Fig. 7 y 8 se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas de aluminio y plata, respectivamente. En las Figs. 7a y 8a se consideraron partículas con relación de aspecto $AR = 2$ constante, en ambas figuras se observan dos máximos locales correspondientes a las frecuencias a las cuales C_{ext} se maximiza al iluminar la partícula en la dirección \hat{e}_x (aluminio: 254 nm, plata: 434 nm) y \hat{e}_z (aluminio: $\lambda = 146$ nm, plata: $\lambda = 344$ nm). En las Figs. 7b y 8b se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas de aluminio y plata, respectivamente, con una relación de aspecto variable; se observa que conforme la relación de aspecto se aproxima a la unidad, hay un corrimiento de las frecuencias asociadas a las $\langle C_{ext} \rangle$ máximas hacia la frecuencia de resonancia (aluminio: 201 nm, plata: 383 nm) asociada a una esfera inmersa en agua. Tanto en el caso del aluminio como el de la plata se observa que al aumentar su relación de aspecto, así como la longitud de su eje mayor, la $\langle C_{ext} \rangle$ aumenta.

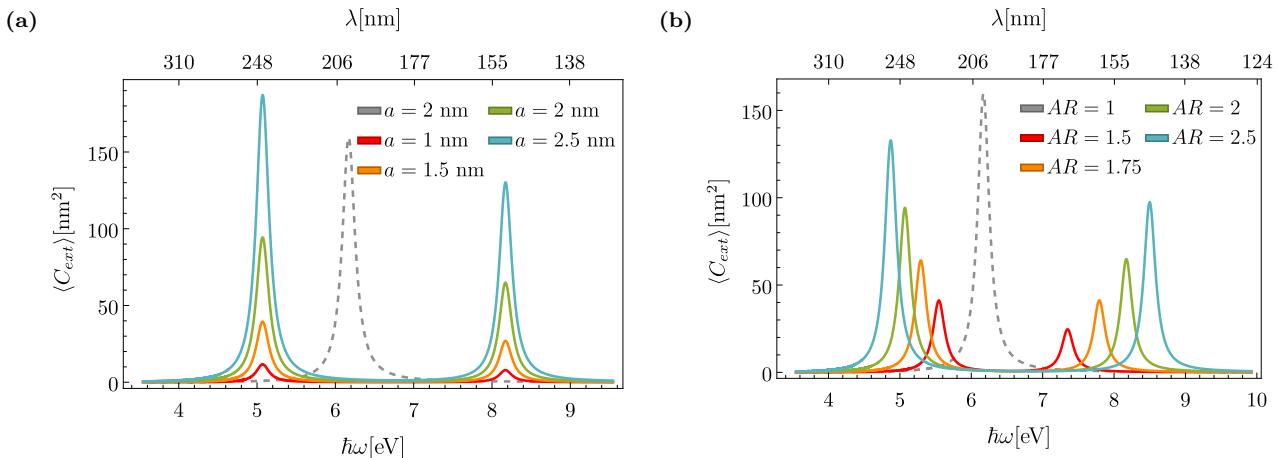


Fig. 7: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de aluminio caracterizada por su función dieléctrica dada por el modelo de Drude ($\hbar\omega_p = 13.142$ eV, $\hbar\gamma = 0.197$ eV) e inmersa en agua ($n_m = 1.33$). **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante.

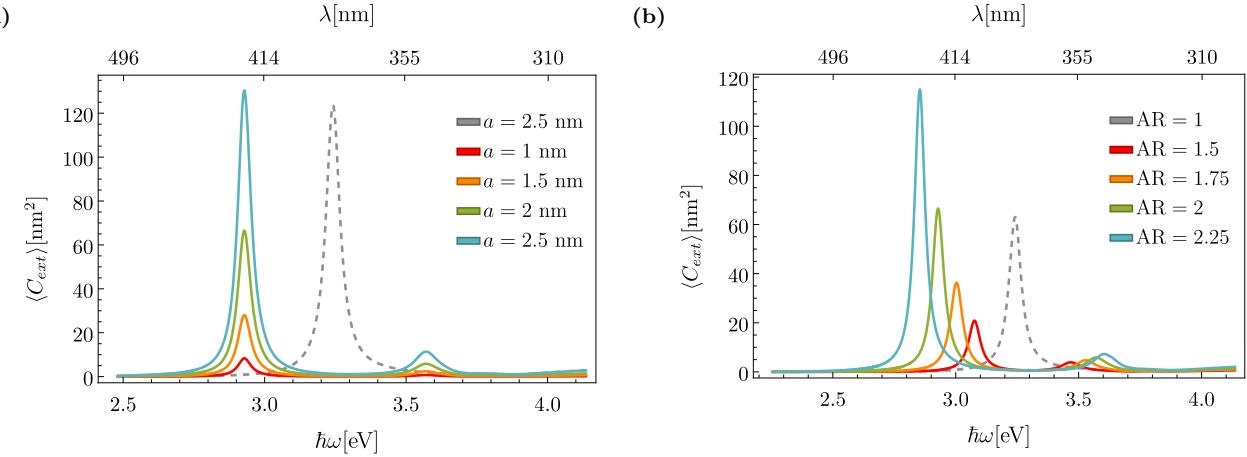


Fig. 8: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de plata, cuyo índice de refracción complejo fue obtenido a partir de datos experimentales e inmersa en agua ($n_m = 1.33$). **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante. nm

Oro y bismuto

En la Fig. 9 se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas de oro, así como la parte imaginaria y real de su función dieléctrica. En la Fig. 9a se consideraron partículas con relación de aspecto $AR = 2$ y en la Fig. 9b se consideraron partículas con relación de aspecto variable; se observa que conforme la relación de aspecto se aproxima a la unidad, hay un corrimiento de las frecuencias asociadas a las $\langle C_{ext} \rangle$ máximas hacia una frecuencia de resonancia (557 nm) asociada a una esfera de oro inmersa en agua.

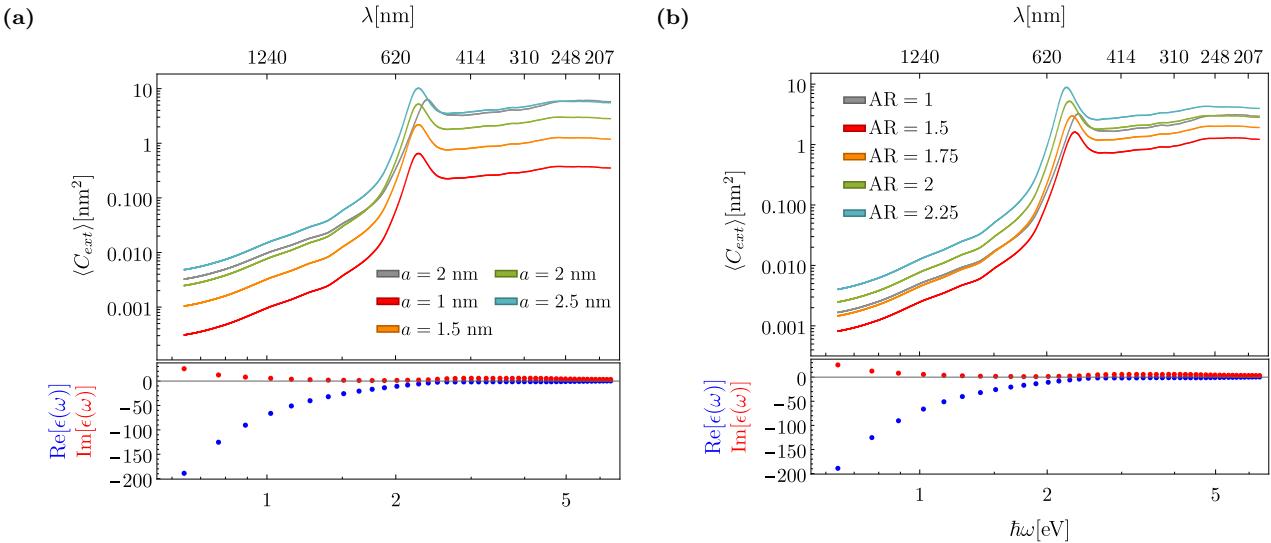


Fig. 9: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de oro, cuyo índice de refracción complejo fue obtenido a partir de datos experimentales e inmersa en agua ($n_m = 1.33$) y curvas de comparación del índice de refracción (parte real en azul, parte imaginaria en rojo) como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para el oro. **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante.

En la Fig. 10 se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas de bismuto, así como la parte imaginaria y real de su índice de refracción. En la Fig. 10a se consideraron partículas con relación de aspecto $AR = 2$ y en la Fig. 10b se consideraron partículas con relación de aspecto variable. En ambas figuras es posible observar una frecuencia de resonancia de alrededor de los 154 nm.

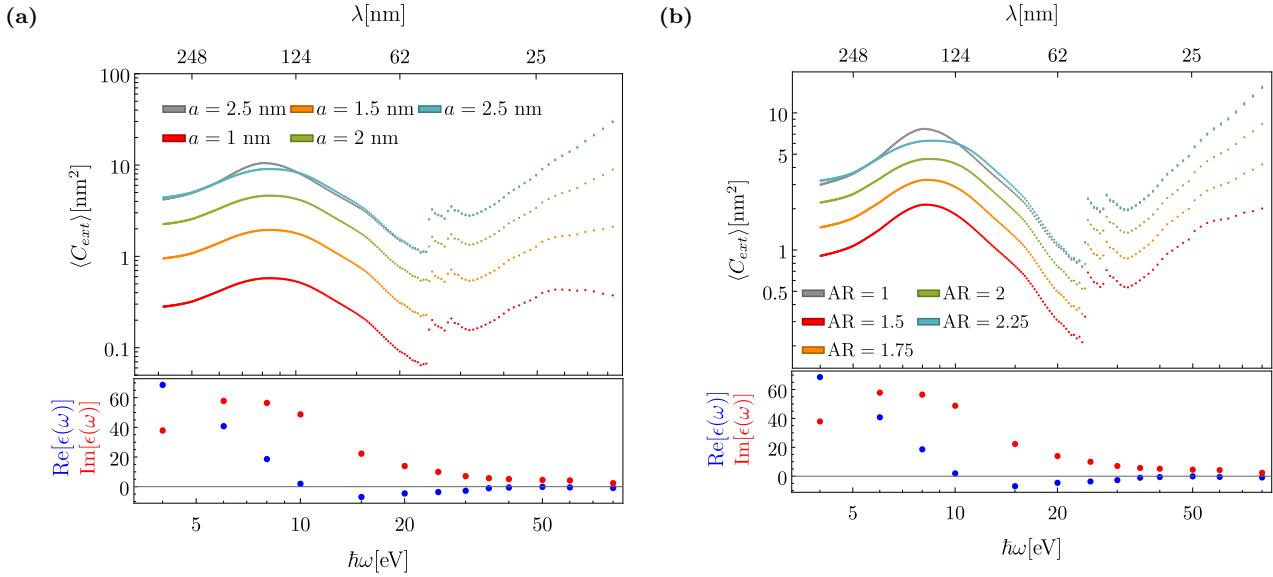


Fig. 10: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de bismuto, cuyo índice de refracción complejo fue obtenido a partir de datos experimentales e inmersa en agua ($n_m = 1.33$) y curvas de comparación de la función dieléctrica (parte real en azul, parte imaginaria en rojo) como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para el bismuto. **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante.

Óxido de magnesio

En la Fig. 11 se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas de bismuto, así como la parte imaginaria y real de su índice de refracción. En la Fig. 11b se consideraron partículas con relación de aspecto $AR = 2$ y en la Fig. 11a se consideraron partículas con relación de aspecto variable. En ambos casos se observa que la $\langle C_{ext} \rangle$ tiene un comportamiento creciente pues, dado que en el espectro de las ondas de radio, la contribución de la absorción es nula y la única contribución es la del esparcimiento, que aumenta al disminuir la longitud de onda.

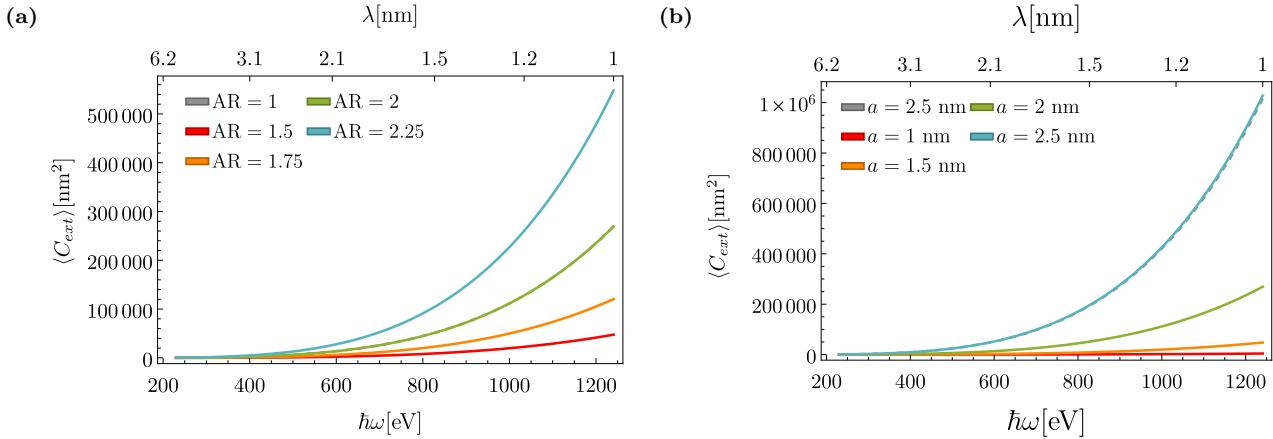


Fig. 11: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de óxido de magnesio, cuyo índice de refracción complejo fue obtenido a partir de datos experimentales e inmersa en agua ($n_m = 1.33$) y curvas de comparación de la función dieléctrica (parte real en azul, parte imaginaria en rojo) como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para el bismuto. **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante.

III. CONCLUSIONES

- Se logró caracterizar la respuesta óptica de elipsoides de diferentes materiales y tamaños dentro de la nanoescala en términos de las secciones transversales de absorción, esparcimiento y extinción, bajo la aproximación cuasiestática, para partículas elipsoidales oblatas de aluminio, plata, oro, bismuto y óxido de magnesio.
- Se encontró que para partículas cuyo diámetro es menor a 5 nm, la contribución predominante en la extinción es la absorción, mientras que el esparcimiento es despreciable.
- En los materiales que presentan un comportamiento que se ajusta con el modelo de Drude, es posible observar las dos resonancias plasmónicas correspondientes a iluminar la partícula en las direcciones \hat{e}_x y \hat{e}_z
- En las partículas semimetálicas, como el oro y el bismuto se observan distintas resonancias, no necesariamente plasmónicas, asociadas a transiciones interbanda o intrabanda y estrechamente relacionadas con sus funciones dieléctricas
- Para las partículas de óxido de magnesio, se observó que la sección transversal de extinción es creciente, comportamiento debido a su naturaleza dieléctrica.

REFERENCIAS

- [1] Antunes, A., Pontes, J. H., Monte, A. F., Barbosa, A., & Ferreira, N. M. (2019, September). Optical properties on bone analysis: an approach to biomaterials. In *Proceedings* (Vol. 27, No. 1, p. 36). MDPI.
- [2] Yoon, J., Jo, Y., Kim, M. H., Kim, K., Lee, S., Kang, S. J., & Park, Y. (2017). Identification of non-activated lymphocytes using three-dimensional refractive index tomography and machine learning. *Scientific reports*, 7(1), 6654.
- [3] Bosschaart, N., Edelman, G. J., Aalders, M. C., van Leeuwen, T. G., & Faber, D. J. (2014). A literature review and novel theoretical approach on the optical properties of whole blood. *Lasers in medical science*, 29, 453-479. DOI:10.1007/s10103-021-03361-7
- [4] Eremina, E., Hellmers, J., Eremin, Y., & Wriedt, T. (2006). Different shape models for erythrocyte: Light scattering analysis based on the discrete sources method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 102(1), 3-10.
- [5] Borovoi, A. G., Naats, E. I., & Oppel, U. G. (1998). Scattering of light by a red blood cell. *Journal of biomedical optics*, 3(3), 364-372.
- [6] Larsson, J. (2007). Electromagnetics from a quasistatic perspective. *American Journal of Physics*, 75(3), 230-239.
- [7] Rosas, C. M. G. (2019). *Respuesta electromagnética de nanopartículas magnético/metálicas tipo core-shell* (Doctoral dissertation, Universidad Nacional Autónoma de México).
- [8] Bohren, C. F., & Huffman, D. R. (2008). *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons.
- [9] Griffiths, D. J. (2023). *Introduction to electrodynamics*. Cambridge University Press.
- [10] Jackson, J. D. (2021). *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons.
- [11] Weisstein, E. W. *Confocal Ellipsoidal Coordinates*. Recuperado el 27 de marzo de 2024, de MathWorld—A Wolfram Web Resource. <https://mathworld.wolfram.com/ConfocalEllipsoidalCoordinates.html>
- [12] Arfken, G. B., Weber, H. J., & Harris, F. E. (2011). *Mathematical methods for physicists: a comprehensive guide*. Academic press.

- [13] Braun, M., & Golubitsky, M. (1983). *Differential equations and their applications* (Vol. 2). New York: Springer-Verlag.
- [14] Kellogg, O. D. (2012). *Foundations of potential theory* (Vol. 31). Springer Science & Business Media.
- [15] Abramowitz, M., & Stegun, I. A. (Eds.). (1948). *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables* (Vol. 55). US Government printing office.
- [16] Rakić, A. D. (1995). Algorithm for the determination of intrinsic optical constants of metal films: application to aluminum. *Applied optics*, 34(22), 4755-4767.
- [17] Johnson, P. B., & Christy, R. W. (1972). Optical constants of the noble metals. *Physical review B*, 6(12), 4370.
- [18] Hagemann, H. J. (1974). *Optical Constants from the Far Infrared to the X-ray Region*.
- [19] Stephens, R. E., & Malitson, I. H. (1952). Index of refraction of magnesium oxide. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 49(4), 249-252.